



Prise en compte précise de géométries complexes pour l'approximation d'EDP sur grilles cartésiennes et leur simulation en calcul parallèle

Lisl Weynans

► To cite this version:

Lisl Weynans. Prise en compte précise de géométries complexes pour l'approximation d'EDP sur grilles cartésiennes et leur simulation en calcul parallèle. Analyse numérique [math.NA]. Université de Bordeaux, 2018. tel-01971516

HAL Id: tel-01971516

<https://inria.hal.science/tel-01971516>

Submitted on 7 Jan 2019

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Habilitation à diriger des recherches
en Mathématiques Appliquées et Calcul Scientifique

**Prise en compte précise de géométries complexes
pour l'approximation d'EDP sur grilles cartésiennes
et leur simulation en calcul parallèle.**

Lisl Weynans

Soutenance le 4 décembre 2018 devant le jury :

Héloïse BEAUGENDRE
Christophe BESSE
Georges-Henri COTTET
Yves COUDIERE
Frédéric GIBOU
Florence HUBERT
Angelo IOLLO

Université de Bordeaux
Université de Toulouse
Université de Grenoble
Université de Bordeaux
Santa Barbara University
Université Aix-Marseille
Université de Bordeaux

Examinatrice
Rapporteur
Examinateur
Examinateur
Rapporteur
Rapporteuse
Examinateur

Table des matières

I	Introduction	3
I.1	Représentation des géométries	3
I.2	Méthodes de frontières immergées	4
I.3	Quelle précision près des interfaces ?	5
I.4	Organisation du document	6
II	Mécanique des fluides sur grilles cartésiennes	9
II.1	Ecoulements compressibles dans des domaines complexes	9
II.1.1	Résolution dans le domaine fluide	9
II.1.2	Une condition d'imperméabilité au second ordre : modification des flux	10
II.1.3	Validation numérique	12
II.2	Condition aux limites génératrice pour les équations de Boussinesq	14
II.2.1	Contexte	14
II.2.2	Reformulation des équations	15
II.2.3	Discretisation des équations	17
II.2.4	Validation numérique	17
II.3	Méthodes particulières pour des écoulements compressibles	19
II.3.1	Consistance et précision des méthodes particulières avec remaillage	20
II.3.2	Méthodes particulières TVD pour des lois de conservation non-linéaires	22
II.4	Transport optimal	24
II.4.1	Méthode itérative	25
II.4.2	Validations numériques	26
II.5	Level-set d'ordre élevé au cours du temps	27
II.5.1	Schémas de ré-initialisation d'ordre élevé	28
II.5.2	Validations numériques	31
II.6	Modélisation et simulation de suspensions de particules	32
II.6.1	Modèle et résolution numérique dans le fluide	33
II.6.2	Le modèle de correction local des forces de lubrification	34
II.6.3	Validations du modèle local de lubrification pour des particules sphériques	35
II.6.4	Etude du modèle local de lubrification pour des particules ellipsoïdales	36
III	Problèmes elliptiques avec géométries complexes	39
III.1	Résolution de problèmes elliptiques avec des interfaces immergées	39
III.1.1	Description de la méthode	40
III.1.2	Validation numérique	43
III.2	Electroporation de cellules biologiques	43
III.2.1	Modèle d'électroperméabilisation	44
III.2.2	Résolution numérique du modèle d'électroporation	45
III.2.3	Convergence de la méthode en une dimension	46
III.2.4	Validations numériques	47
III.3	Simulation d'écoulements bifluïdes avec forts ratios de densité	48
III.3.1	Présentation de la méthode	49
III.3.2	Validation numérique	52
III.4	Convergence de schémas numériques pour des problèmes elliptiques dans des domaines complexes	55

III.4.1	Fonctions de Green discrètes	55
III.4.2	Super-convergence du gradient pour la méthode de Shortley-Weller	56
III.4.3	Etude de la convergence d'une méthode pour des problèmes elliptiques avec des interfaces	58
III.5	Modélisation et simulation de matériaux électrostrictifs	64
III.5.1	Contexte et modélisation	64
III.5.2	Schéma numérique sur octrees	65
III.5.3	Résultats numériques	67
IV	Conclusion	69

Chapitre I

Introduction

Ce document présente un résumé de mes travaux depuis mon arrivée à l'Université de Bordeaux. Pendant cette période, j'ai travaillé essentiellement sur le développement de schémas numériques sur grilles cartésiennes, pour simuler des problèmes modélisés par des équations aux dérivées partielles, principalement de type transport et diffusion. Plus précisément, des problèmes issus de la mécanique des fluides, de la biologie, et brièvement, de la chimie des matériaux. Qu'il s'agisse d'un écoulement autour d'un objet solide ou de modélisation du comportement électrique de cellules biologiques, dès que l'on considère un problème avec une géométrie réaliste, il est naturel de considérer la présence d'obstacles, d'interfaces ou de frontières de forme quelconque. Il s'agit très souvent d'interfaces physiques entre des milieux aux propriétés différentes, par exemple, l'interface entre deux fluides, entre un fluide et un solide, ou entre une cellule biologique et le milieu extérieur. Mais l'interface peut aussi représenter le bord du domaine, comme dans le cas des équations de Boussinesq, ou bien la frontière entre deux zones avec des discrétisations différentes, comme dans le cas pour une discrétisation avec des octrees. Dans tous les cas, comme ces frontières ou interfaces marquent la séparation entre des milieux aux propriétés différentes, se pose la question de la précision de la résolution numérique dans leur voisinage. C'est cette question qui a majoritairement guidé mes travaux de recherche et que je vais présenter dans ce mémoire à travers différentes applications.

Les références bibliographiques fournies dans ce document ne sont pas exhaustives, mais servent simplement à illustrer mes propos. Pour plus de détails sur les états de l'art correspondant aux différentes parties, je renvoie le lecteur ou la lectrice intéressés aux articles correspondants.

I.1 Représentation des géométries

Pour les besoins de notre discrétisation, une grille cartésienne a priori uniforme recouvre l'ensemble du domaine dans lequel nous voulons résoudre numériquement le problème considéré. Le pas d'espace est noté h , et les coordonnées des points de la grille sont définies par $(x_i, y_j, z_k) = (ih, jh, kh)$. Les points sur la grille sont nommés soit avec des lettres telles que P ou Q , ou bien avec des lettres et des indices, tels que $M_{i,j,k} = (x_i, y_j, z_k)$ si nous avons besoin de localiser les points par rapport à leurs voisins.

L'interface peut être représentée de diverses façons : marqueurs lagrangiens, comme dans les méthodes Marker-and-Cell [81] ou de Front Tracking [159], reconstruction polynomiale par morceaux permettant des formulations conservatives, comme pour les méthodes de type Volume of Fluid [84] [153] ou Cut Cell [38] [27], ou bien représentation implicite de l'interface par une méthode level-set [134] [133].

Nous avons choisi dans le cadre de ces travaux d'utiliser une fonction level-set pour représenter les géométries que nous souhaitons prendre en compte. L'isoligne zéro de la fonction level-set, qui est souvent définie comme la fonction distance signée à l'interface :

$$\varphi(x) = \begin{cases} \text{dist}_\Gamma(x) & \text{à l'extérieur de l'interface} \\ -\text{dist}_\Gamma(x) & \text{à l'intérieur de l'interface} \end{cases} \quad (\text{I.1.1})$$

représente implicitement l'interface Γ qui est immergée dans le domaine de calcul (Figure I.1). Si l'interface est suffisamment régulière, et que son évolution au cours du temps est calculée avec une précision d'ordre suffisant, la normale à l'interface et la courbure peuvent être définies avec les formules suivantes, qui se discrétisent facilement avec des formules de différences finies classiques :

$$\mathbf{n}(x) = \frac{\nabla \varphi(x)}{|\nabla \varphi(x)|}, \quad \kappa = \nabla \cdot \mathbf{n}. \quad (\text{I.1.2})$$

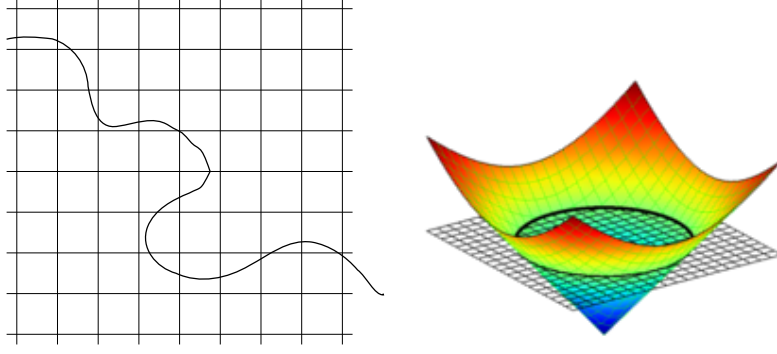


FIGURE I.1 – Gauche : interface complexe et grille cartésienne, droite : exemple de fonction level-set sur une grille cartésienne

Si l'interface Γ se déplace au cours du temps, on note Γ_0 sa position au temps initial. L'évolution de Γ est reconstruite à partir du calcul de l'évolution de φ , qui satisfait l'équation non-conservative

$$\partial_t \varphi + U \cdot \nabla \varphi = 0, \quad (\text{I.1.3})$$

$$\varphi|_{t=0} = d_0, \quad (\text{I.1.4})$$

avec d_0 la distance signée à Γ_0 , et $U(x, t)$ le champ de vitesse utilisé pour le transport de φ . De manière similaire, nous utiliserons la notation d pour la distance signée à Γ .

L'usage d'une level-set est particulièrement justifié sur une grille cartésienne de part l'équation I.1.3 et les formules I.1.2, qui permettent de calculer facilement l'évolution et les propriétés géométriques de l'interface avec des formules de différences finies standard à partir des valeurs discrétisées sur les points de la grille, au lieu de procéder à des reconstructions complexes comme avec les autres types de méthodes évoquées précédemment. (Evidemment, celles-ci ont d'autres avantages qui leur sont propres). On peut ainsi si on le souhaite reconstruire à chaque étape l'interface. La précision du résultat dépendra de la méthode choisie pour décrire et résoudre l'évolution de la level-set. En effet, comme on l'abordera dans la section dédiée au calcul de fonctions level-set d'ordre élevé, en cas d'interface mobile le calcul de l'évolution de la fonction level-set occasionne inévitablement une perte de précision. Cette perte de précision a des conséquences sur le calcul des quantités présentées ci-dessus, mais aussi sur la conservation des quantités conservatives telles que la masse et la quantité de mouvement.

I.2 Méthodes de frontières immergées

La discrétisation sur grille cartésienne présente l'avantage d'autoriser une parallélisation aisée, et l'utilisation de splitting directionnel pour la construction des méthodes numériques, ce qui les rend faciles à coder, et permet d'utiliser des bibliothèques de calcul efficaces comme par exemple PETSc [8]. Elle évite aussi de devoir générer et adapter des maillages, une tâche qui devient très coûteuse quand les frontières ou interfaces se déplacent ou se déforment. En revanche, les géométries ainsi décrites ne coïncident évidemment pas dans le cas général avec la discrétisation sur grille cartésienne. Or il est nécessaire de prendre en compte sur les frontières de ces géométries les conditions aux limites ou les conditions de couplage imposées par les modèles physiques, sans quoi des problèmes de perte de précision ou même de stabilité apparaissent. Par exemple, dans le cas d'un écoulement incompressible bifluide avec des densités très différentes, un traitement naïf consistant à appliquer brutalement un schéma conçu pour un seul fluide près de l'interface ne sera pas consistant et produira la plupart du temps des problèmes de stabilité très sévères, liés à la mauvaise approximation des gradients pour la pression et à des transferts erronés de masse et de quantité de mouvement entre les fluides.

Ces réflexions nous amènent à catégoriser les points de la grille suivant le fait qu'on puisse ou pas leur appliquer un schéma numérique classique sans prendre en compte la position de la frontière ou interface. Un point de grille sera classé comme "régulier" si le stencil utilisé pour le calcul sur ce point utilise uniquement des points qui sont situés du même côté de l'interface, et comme "irrégulier" si ce stencil fait appel à des points situés de l'autre côté de l'interface. En général dans la suite de ce document les points irréguliers sont donc les points pour lesquels un des voisins directs porte une valeur de la level-set de signe opposé.

Une partie importante de mes travaux a consisté à construire des schémas adaptés près des frontières ou interfaces, notamment sur les points dits "irréguliers", et donc tenant compte de ces conditions aux limites ou de couplage. Ces schémas

adaptés doivent permettre de maintenir la précision des calculs dans tout le domaine, y compris près de l'interface considérée. En pratique, on cherche souvent à obtenir une précision d'ordre deux, qui représente pour les applications visées un bon compromis entre performance de la méthode et complexité algorithmique. Le développement de ces schémas s'est fait dans l'objectif d'en permettre une parallélisation facile. Puisque la discrétisation sur grille cartésienne limite énormément les problèmes de partitionnement de maillage, cette contrainte signifie surtout que les stencils utilisés pour les schémas numériques ne doivent pas être trop étendus. Dans certains cas, comme l'ajout d'inconnues supplémentaires sur l'interface dans la section III.1, une attention particulière à la numérotation des degrés de liberté sera tout de même nécessaire. Dans le cas d'une discrétisation sur maillages cartésiens avec des octrees, comme dans la section III.5 la problématique de la numérotation a également une influence sur les choix de discrétisation, dans le but de limiter les communications entre processeurs.

Mes travaux s'inscrivent donc dans le cadre des méthodes de type frontières immergées, c'est à dire, au sens large, des schémas numériques pour lesquels la grille de discrétisation ne coïncide pas avec la géométrie considérée. Ces méthodes ont été initiées pour différents types d'équations par Peskin [139] (écoulements sanguins dans le coeur avec des frontières élastiques), Arquis et Caltagirone [7] (écoulements incompressibles avec obstacles), Berger et Leveque [16, 17] (écoulement compressibles avec obstacles), Leveque et Li [110] (problèmes elliptiques avec des interfaces immergées), Fedkiw [66, 65] (écoulements multiphasiques) puis développées largement par la suite sous des formes de plus en plus sophistiquées. L'idée générale pour cette classe de méthodes est donc de prendre en compte les conditions aux limites ou les conditions de transmission au travers d'une interface par une modification locale des équations à résoudre plutôt que par l'utilisation d'un maillage adapté. A noter que les techniques de frontières immergées ne sont pas réservées aux grilles cartésiennes même si c'est le cadre où on les rencontre le plus souvent. Par exemple, une technique de pénalisation sur maillages structurés a été développée récemment dans [3]. Dans cette référence, le fait d'utiliser des maillages localement raffinés renforce la précision près de la frontière, pendant que l'utilisation de la pénalisation lève l'obligation d'utiliser un maillage parfaitement adapté à la géométrie considérée, et diminue donc le coût de la phase d'adaptation de maillage.

I.3 Quelle précision près des interfaces ?

Les méthodes de frontières immergées modifient donc localement les équations à résoudre, soit au niveau continu, soit au niveau discret, pour prendre en compte les conditions aux limites ou de transmission sur les bords des géométries considérées. Le principe est de compenser le manque d'informations dû au fait que les points de grille ne suivent pas tous les mêmes lois d'évolution, en utilisant comme relations supplémentaires ces conditions aux limites ou de transmission.

En pratique, même en utilisant ces relations supplémentaires, la discrétisation sur les points dits irréguliers est plus complexe que sur les points réguliers, surtout lorsqu'on cherche à maintenir une discrétisation d'ordre plus élevé que un. En effet, d'une part, le fait de ne pas disposer de certains points dans la construction du stencil oblige à rechercher les informations manquantes dans la direction opposée à l'interface, ce qui augmente la taille du stencil de manière asymétrique. D'autre part, l'incorporation des conditions aux limites ou de transmission n'est pas toujours immédiate, car ces conditions doivent être satisfaites sur des points qui ne sont justement pas les points de la grille. En pratique, pour arriver à un compromis entre la complexité du schéma et la précision des résultats numériques, il est souvent choisi d'utiliser une discrétisation d'ordre légèrement inférieur près de l'interface. Ce choix est d'ailleurs parfois fait inconsciemment car des mécanismes de compensation permettent souvent de maintenir la précision du schéma si cette discrétisation moins précise n'est réalisée que sur un nombre de points négligeable par rapport au nombre de points total. Une des premières études sur le sujet a été effectuée par Gustafsson [78], sur l'imposition de conditions aux limites pour une EDP d'évolution sur un domaine uniforme en une dimension.

Cependant, l'influence d'une discrétisation moins précise sur une interface ou une frontière du domaine a un impact différent suivant le type de problème qu'on considère. Par exemple, en ce qui concerne les équations de Navier-Stokes compressibles ou incompressibles en présence d'obstacles solides, il est assez facile d'imposer à l'ordre deux la condition d'adhérence sur la frontière du solide. On peut par exemple créer des valeurs fantômes sur les points irréguliers situés dans le solide, par une extrapolation linéaire de la vitesse dans le fluide, comme dans [161], [129], [19] [99] ou de nombreuses autres références. Par contre, dans le cas d'écoulements compressibles non-visqueux, imposer ce même ordre deux sur la frontière solide requiert des techniques plus poussées. Dans ce cas, la condition aux limites à imposer implicitement est une condition de non-glissement, qui ne concerne donc que la composante normale de la vitesse, la composante tangentielle pouvant être discontinue par rapport à la vitesse du solide. Par exemple, pour construire des valeurs fantômes, Forrer et Jeltsch [69] calculent les intégrales de fonctions constantes par morceaux sur des polygones construits comme les symétriques des cellules fluides par rapport à la frontière, pendant que Dadone et Grossman [55] utilisent un modèle isentropique près du bord solide et calculent une pression corrigée tenant compte de la courbure de l'interface. Pour appuyer cette constatation, notons que dans une étude d'une approximation semi-discrète d'équations hyperboliques et

paraboliques [1] Abarbanel et al. montrent que si l'ordre de l'approximation sur la frontière est inférieur à celui dans le domaine intérieur, l'ordre de convergence est plus bas dans le cas hyperbolique que dans le cas parabolique. Dans [155] Tan et Shu utilisent une "procédure de Lax-Wendroff inverse" (ILW) pour traiter les conditions aux limites pour des systèmes de lois de conservation hyperboliques. Ils utilisent les équations du système pour écrire les dérivées normales en fonction des dérivées partielles en temps et des conditions au bord. Nous utiliserons ce principe pour imposer des conditions aux limites entrantes dans le cas des équations de Boussinesq non-linéaires.

En ce qui concerne la résolution de problèmes elliptiques en présence de frontières ou d'interfaces complexes, soulignons d'abord que l'erreur commise dans l'approximation d'un opérateur elliptique a une influence sur la solution numérique dans tout le domaine de calcul. Ce phénomène est l'équivalent discret du fait que le terme source de l'équation aux dérivées partielles elliptique associée influe sur la solution dans le domaine tout entier. En conséquence, une erreur de troncature plus forte sur certains points ne détériore pas forcément l'ordre de convergence, si ces points sont suffisamment peu nombreux. Il a été ainsi observé pour de nombreux schémas numériques et parfois prouvé, comme par exemple dans [11] qu'une erreur de troncature d'ordre un sur l'approximation de l'opérateur elliptique le long d'une interface permet d'avoir une convergence à l'ordre deux si la discrétisation sur le reste des points est bien à l'ordre deux. Par un phénomène similaire, les méthodes numériques de type Ghost-Cell [63, 73] ne sont formellement pas consistantes aux sens des différences finies sur les points de grille voisins du bord du domaine et y ont une erreur de troncature d'ordre $O(1)$. Pourtant, elle sont en pratique d'ordre deux quand elles servent à imposer des conditions de type Dirichlet. Dans ce cas l'erreur de troncature plus forte est située sur le bord du domaine, et elle a alors une influence encore moindre sur la solution que si elle était localisée sur le même nombre de points à l'intérieur du domaine.

Enfin, le fait d'utiliser des schémas adaptés pour maintenir la consistance et la précision des schémas numériques ne suffit pas lorsque les différentes échelles des phénomènes étudiés varient trop fortement pour pouvoir toutes les résoudre avec un coût de calcul raisonnable. Dans ce cas une première stratégie consiste à utiliser un raffinement local de la grille cartésienne, par exemple en utilisant une structure d'octree. Cette problématique sera abordée dans la section III.5 dans le cadre de la modélisation de matériaux électrostrictifs. Une autre possibilité est d'éviter de résoudre les équations dans la zone sous-résolue, en utilisant localement un modèle reproduisant le comportement attendu de leur solution. Cette stratégie sera utilisée dans la section II.6.4 pour prendre en compte les forces de lubrification intervenant dans les interactions à courte distance entre des particules dans un fluide.

I.4 Organisation du document

Dans la suite de ce document, je vais présenter mes travaux selon un découpage en deux chapitres. Le premier chapitre concerne les travaux davantage reliés à la résolution de problèmes de transport, avec des applications en mécanique des fluides. Le second chapitre concerne la résolution de problèmes elliptiques, avec plusieurs applications différentes : des phénomènes électriques comme l'électroporation de cellules biologiques ou les matériaux électrostrictifs, mais aussi à nouveau la mécanique des fluides, dans le cas d'écoulements incompressibles bifluïdes. Ce découpage méthodologique me paraît commode parce que ces deux groupes de phénomènes partagent des éléments communs de modélisation physique et de résolution numérique. Cependant il y a des liens forts entre les deux parties, par exemple le calcul d'une level-set d'ordre élevé dans le premier chapitre sera utilisé pour les écoulements bifluïdes dans le second chapitre.

Dans le premier chapitre, je commencerai par présenter une méthode développée pour la simulation d'écoulements compressibles en présence d'obstacles, conçue pour préserver une précision d'ordre deux globale. Puis, dans le cas des équations de Boussinesq non-linéaires, je présenterai une méthode développée pour traiter une condition aux limites génératrice afin de pouvoir imposer de manière stable et précise la hauteur d'eau en entrée du domaine. Je présenterai ensuite l'étude d'une méthode particulière avec des formules de remaillage TVD pour des écoulements compressibles et son analyse de convergence. Le même type de méthode particulière sera ensuite utilisé dans un algorithme pour résoudre des problèmes de transport optimal. Ce sujet peut sembler de prime abord éloigné de la thématique générale du mémoire. Il y est cependant relié car cette méthode pour le transport optimal a été utilisée à plusieurs reprises dans d'autres travaux pour calculer les vitesses à imposer sur les frontières d'un solide immergé dans un fluide à partir de séries d'images. La problématique de la précision de la fonction level-set au cours du temps, et notamment le besoin de calculer avec précision la géométrie de l'interface tout le long de la simulation, nous a amené à nous intéresser au calcul de l'évolution de cette fonction level-set, et je présenterai quelle stratégie nous avons développée pour garantir un ordre élevé. Enfin, j'aborderai le sujet de la simulation des interactions entre particules solides immergées dans un fluide incompressible. Dans ce cas, la méthodologie portera davantage sur la modélisation de ces interactions, car celles-ci ne peuvent être calculées directement de manière fiable quand les particules sont proches du contact.

Dans le second chapitre, je présenterai d'abord un schéma de type différences finies développé pour résoudre à l'ordre deux des problèmes elliptiques avec des interfaces immergées. Puis ce schéma sera adapté à la simulation d'un modèle

d'électroporation de cellules biologiques et à la simulation d'écoulements incompressibles bifluides de type eau-air. Je présenterai ensuite des travaux sur l'analyse de la convergence de schémas sur grilles cartésiennes pour des problèmes elliptiques avec des frontières ou interfaces complexes. Dans une dernière section, j'aborderai le sujet de l'utilisation d'octrees pour résoudre des problèmes elliptiques dans le cas de la modélisation de matériaux électrostrictifs.

Chapitre II

Mécanique des fluides sur grilles cartésiennes

II.1 Ecoulements compressibles dans des domaines complexes

Ce travail a fait l'objet d'une publication dans un journal [75] et d'un proceeding de conférence [76]. Il s'est effectué dans le cadre de la thèse de Yannick Gorsse, co-encadrée avec Angelo Iollo, et dans le contexte plus large du projet ANR Carpeinter. Ce projet portait sur la conception et l'implantation de méthodes numériques sur grilles cartésiennes, avec des géométries complexes prises en compte par des techniques de frontières immergées. Le domaine d'application était la mécanique des fluides : de l'aéronautique aux fluides biologiques en passant par l'environnement. Dans ce contexte, nous avons développé un schéma pour résoudre des écoulements compressibles autour d'obstacles de géométries arbitraires. Nous voulions préserver une précision d'ordre deux malgré le fait que la discrétisation sur maillage cartésien ne coïncide pas avec la géométrie du solide. Dans la suite, la méthode est présentée en deux dimensions par commodité, mais le principe est le même en trois dimensions.

Comme il a été noté dans l'introduction, dans le cas d'écoulements compressibles visqueux on peut assez facilement obtenir de l'ordre deux pour la vitesse près de la frontière solide en imposant sur des points fantômes dans le solide une vitesse consistante à l'ordre deux avec la condition aux limites sur la paroi. En revanche dans le cas des équations d'Euler compressible, cette technique seule ne permet pas d'obtenir la même précision. Les travaux de la littérature reposent sur des techniques plus sophistiquées, soit de type cut-cell, avec une approche conservative comme dans [138], [44] et [45], avec pour résultat un ordre de convergence deux dans le domaine mais seulement un pour les cellules près de l'interface, soit des méthode de type Ghost-cell, avec imposition de la valeur dans des points fantômes, mais par des procédés d'extrapolation plus élaborés. Ainsi Forrer et Jeltsch [69] calculent les intégrales de fonctions constantes par morceaux sur des polygones construits comme les symétriques des cellules fluides par rapport à la frontière. Dadone et Grossman [55] utilisent un modèle isentropique près du bord solide, et calculent une pression corrigée tenant compte de la courbure de l'interface. Les deux méthodes obtiennent une précision similaire à celle des méthodes cut-cell.

Remarquons que si la caractérisation de la forme des cellules "cut-cell" n'est pas triviale en deux dimensions, elle demande un réel effort algorithmique en trois dimensions [142]. De plus, de trop petites cellules "cut-cell" peuvent détériorer la stabilité de la méthode, en imposant un pas de temps très petit pour satisfaire la condition CFL, et les stratégies développées pour surmonter ce problème ajoutent encore de la complexité algorithmique ([16], [17] et [15]). Pour des raisons de simplicité algorithmique, nous avons donc choisi de porter nos efforts sur une méthode plutôt de type Ghost-cell.

II.1.1 Résolution dans le domaine fluide

Le but est de résoudre les équations d'Euler compressible, écrites ci-après avec les notations usuelles, en présence d'un obstacle solide de forme quelconque.

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} &= 0, \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p \mathbf{I}) &= 0, \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla \cdot ((E + p) \mathbf{u}) &= 0,\end{aligned}$$

avec les notations usuelles. Pour un gaz parfait on peut écrire

$$E = \frac{p}{\gamma-1} + \frac{1}{2}\rho \mathbf{u}^2, \quad p = \rho RT \text{ et } c = \sqrt{\gamma RT}.$$

Dans le domaine fluide, pour les cellules qui ne contiennent que du fluide ainsi que leurs voisines directes, on utilise un schéma Volumes Finis classique. Soient W les variables conservatives et $\mathcal{F}^x(W)$, $\mathcal{F}^y(W)$ les flux correspondants dans les directions x et y . En moyennant les équations sur une cellule de la grille cartésienne qui recouvre le domaine, on obtient

$$\frac{dW_{ij}}{dt} + \frac{1}{\Delta_x}(\mathcal{F}^x_{i+1/2j} - \mathcal{F}^x_{i-1/2j}) + \frac{1}{\Delta_y}(\mathcal{F}^y_{ij+1/2} - \mathcal{F}^y_{ij-1/2}) = 0,$$

où W_{ij} est la valeur moyenne des variables conservatives sur la cellule (i, j) , et où par exemple $\mathcal{F}^x_{i+1/2j}$ est le flux numérique moyen dans la direction x sur le côté droit de cette cellule. Ce flux numérique au travers d'une interface entre deux cellules ne comprenant que du fluide est calculé avec un solveur de Riemann approché et une reconstruction MUSCL [108] avec des limiteurs de pente. L'intégration en temps est réalisée avec un schéma Runge-Kutta d'ordre deux.

II.1.2 Une condition d'imperméabilité au second ordre : modification des flux

La condition aux limites à imposer sur la frontière du solide est une condition d'imperméabilité, c'est-à-dire qu'on impose la vitesse normale sur la frontière, qui sera nulle dans le cas d'un mur fixe, mais non nulle pour un mur mobile : pour un point A sur la frontière du solide on veut $\mathbf{u}_A \cdot \mathbf{n}_A = 0$, avec \mathbf{u}_A la vitesse du fluide sur le bord du solide, et \mathbf{n}_A la normale extérieure à ce solide.

Nous voulons imposer cette condition à l'ordre deux afin de maintenir sur le bord du domaine fluide une précision cohérente avec celle du schéma numérique dans le domaine fluide. Le schéma Volumes Finis est donc modifié pour les cellules où le calcul du flux numérique fait intervenir des cellules qui se trouvent au moins en partie dans le solide.

On commence par expliquer le principe en une dimension, illustré Figure II.1. L'idée est de construire des états fictifs dans les points de grille situés dans le solide mais voisins du fluide, qui permettent, lors de la résolution du problème de Riemann associé, d'obtenir les conditions aux limites voulues. En $i + 1/2$, l'état gauche du problème de Riemann $U_- = (u_-, p_-, c_-)$ est calculé classiquement avec une reconstruction MUSCL. L'état droit fictif que nous créons est alors $U_+ = (2\mathbf{u}^* - u_-, p_-, c_-)$, où \mathbf{u}^* est la valeur de la vitesse que nous voulons imposer sur la face de la cellule pour prendre en compte la condition aux limites sur la frontière du solide. Cet état fictif permet d'obtenir une vitesse de discontinuité de contact de valeur \mathbf{u}^* lors de la résolution du problème de Riemann approché à l'interface entre les cellules i et $i + 1$.

On calcule la valeur \mathbf{u}^* par une formule d'interpolation utilisant les valeurs de la vitesse sur les points de grille fluides voisins et celle qu'on veut imposer sur la frontière.

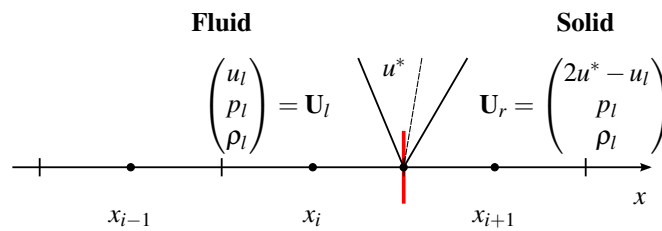


FIGURE II.1 – Principe de la méthode en une dimension.

En deux dimensions, une situation typique est représentée sur la Fig. II.2). Le point sur la frontière apparaissant naturellement dans ce contexte est l'intersection entre l'interface ($\varphi = 0$) et le segment connectant les centres des deux cellules concernées. Le principe est le même qu'en une dimension. On crée un état fictif, par exemple entre les cellules (i, j) et $(i + 1, j)$ sur la Fig. II.2, qui sera utilisé pour calculer le flux numérique entre ces cellules. On calcule les variables primitives à gauche u_-, p_-, c_- relatives au problème de Riemann qu'on souhaite résoudre sur l'interface $(i + 1/2, j)$ par une reconstruction MUSCL classique.

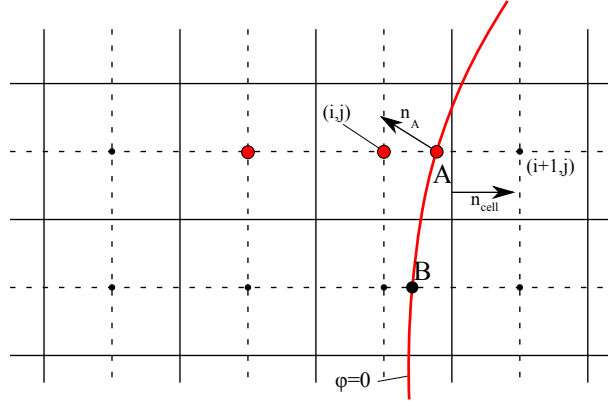


FIGURE II.2 – Exemple de configuration géométrique à l'interface. A est le point d'interface situé entre (i, j) et $(i+1, j)$. Le flux au travers de l'interface $(i+1/2, j)$ est modifié afin d'imposer la condition aux limites en A.

II.1.2.1 Calcul de \mathbf{u}^*

Sur la Figure II.2, on note d la distance normalisée entre $x_{i,j}$ et A. La condition aux limites à imposer est

$$\mathbf{u}_A \cdot \mathbf{n}_A = 0,$$

avec \mathbf{u}_A la vitesse de l'obstacle, $\mathbf{n}_A = (n_x, n_y)^t$ et $\boldsymbol{\tau}_A = (\tau_x, \tau_y)^t$ respectivement la normale et la tangente au bord du domaine au point A. C'est donc la composante normale de \mathbf{u}^* , notée $u_n^* = \mathbf{u}^* \cdot \mathbf{n}_A$, qui est l'objet d'une interpolation selon le même principe qu'en une dimension. Par contre la composante tangentielle $u_\tau^* = \mathbf{u}^* \cdot \boldsymbol{\tau}_A$ n'est l'objet d'aucune condition, on prolonge donc simplement la valeur obtenue lors du calcul de l'état gauche par la reconstruction MUSCL.

$$\left. \begin{array}{l} u_n^* = \mathbf{u}_A \cdot \mathbf{n}_A + \left(\frac{1}{2} - d\right) s_A^n \\ u_\tau^* = \mathbf{u}_- \cdot \boldsymbol{\tau}_A \end{array} \right\} \Rightarrow \mathbf{u}^* = \begin{pmatrix} u_n^* n_x + u_\tau^* \tau_x \\ u_n^* n_y + u_\tau^* \tau_y \end{pmatrix}$$

La pente s_A^n est définie afin d'obtenir une interpolation d'ordre deux qui reste stable même si d est petit par

$$s_A^n = \mathbf{u}_A \cdot \mathbf{n}_A - \mathbf{u}_{i,j} \cdot \mathbf{n}_A + \frac{1-d}{1+d} (\mathbf{u}_A \cdot \mathbf{n}_A - \mathbf{u}_{i-1,j} \cdot \mathbf{n}_A). \quad (\text{II.1.1})$$

Si un limiteur de pente est nécessaire, la pente limitée est définie par $s_A^{n,l} = \text{minmod}(s_A^n, s_3^n)$, avec $s_3^n = \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}_A - \mathbf{u}_{i-1} \cdot \mathbf{n}_A$. L'état fictif droit correspondant est $U_+ = (-u_- + 2u^*, v^*, p_-, c_-)$, pour un état gauche $U_- = (u_-, v^*, p_-, c_-)$.

II.1.2.2 Valeurs fluides extrapolées

Quand le produit scalaire entre la normale à la frontière du solide et la normale à la cellule de la grille est proche de zéro, voir la Figure II.3 par exemple, alors la condition aux limites ne devrait avoir en pratique que peu d'influence sur le calcul du flux. L'état fictif doit alors être calculé pour prendre en compte cette contrainte.

Comme illustré sur la Figure II.2, et en considérant le flux en $(i+1/2, j)$, l'état de gauche sera $U_- = (u_-, v_w, p_-, c_-)$, et l'état de droite sera $U_+ = (-u_- + 2u_w, v_w, p_w, c_w)$, avec (u_w, v_w, p_w, c_w) obtenu par une interpolation convexe entre l'état fictif défini précédemment permettant d'imposer la condition aux limites et des valeurs obtenues par une extrapolation décentrée "upwind" :

$$\begin{pmatrix} u_w \\ v_w \\ p_w \\ c_w \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} u^* \\ v^* \\ p_- \\ c_- \end{pmatrix} + (1-\alpha) \begin{pmatrix} u_f \\ v_f \\ p_f \\ c_f \end{pmatrix}$$

avec $\alpha = \mathbf{n}_A \cdot \mathbf{n}_{cell}$ et (u_f, v_f, p_f, c_f) les valeurs fluides calculées par une extrapolation linéaire sur le point $x_{i+1/2,j}$ en utilisant les variables et les pentes de la cellule fluide la plus proche dans le sens amont, voir la Figure II.3). Ce procédé de décentrement stabilise la méthode si la normale à l'interface physique forme un angle élevé avec l'interface numérique.

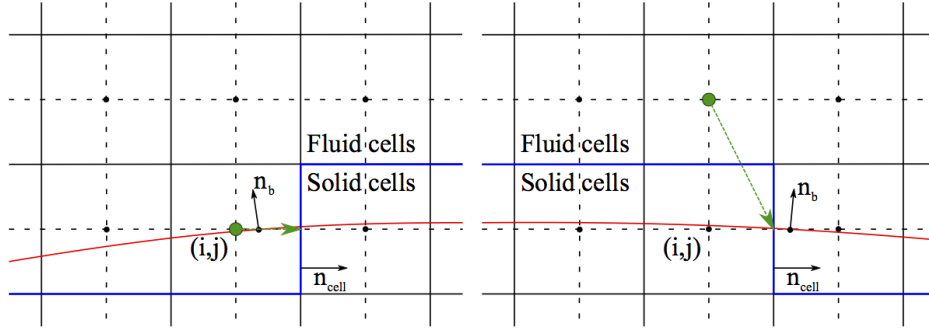


FIGURE II.3 – Cellules (en vert) et stencils utilisés pour l'état extrapolé, si on suppose $u_n^* > 0$.

II.1.2.3 Cas des nouvelles cellules fluides si le solide est en mouvement

Pour gérer l'apparition de cellules fraîchement devenues fluides, une procédure de mise à jour est nécessaire. En effet, les variables des cellules intérieures au solide n'ont pas de valeur valide. Lors du calcul des flux, on garde en mémoire les états intermédiaires des problèmes de Riemann sur les interfaces des cellules solides adjacentes au fluide. Si après le transport de la level-set une cellule solide est devenue fluide, on lui donne comme nouvel état fluide la moyenne des états intermédiaires qui avaient été stockés pour elle.

II.1.3 Validation numérique

II.1.3.1 Etude de convergence

La méthode a été validée en dimension un dans les cas de la réflexion sur un mur d'un choc, d'une onde de raréfaction et d'une impulsion continue. Nous avons ensuite étudié sa convergence en deux dimensions sur une solution exacte : l'écoulement de Ringleb. Nous avons comparé les résultats obtenus à ceux pour trois autres méthodes :

1. une méthode "naive" qui utilise une simple technique de symétrie pour imposer les états fictifs,
2. la méthode ghost-cell CCST [55] qui est une méthode sur grille cartésienne d'ordre deux,
3. une méthode de volumes finis avec un maillage adapté à la géométrie de l'écoulement et des conditions aux limites imposées de manière standard.

Les résultats montrent globalement que la technique de symétrie est seulement d'ordre un en norme L_∞ et en norme L_2 , même si les points fantômes sont calculés en prenant le symétrique de la solution exacte. Les autres schémas sont d'ordre deux en norme L_2 , bien que l'amplitude de l'erreur soit plus faible pour la méthode présentée ici en comparaison à la méthode ghost cell CCST. En ce qui concerne la norme L_∞ , notre schéma et la méthode ghost-cell CCST sont d'ordre deux pour la pression, et d'ordre 1.5 pour la vitesse du son, alors que la méthode body-fitted est d'ordre deux pour toutes les variables, ce qui est logique, étant donné que le maillage adapté permet d'utiliser une méthode standard sans rencontrer de problème pour localiser l'endroit où imposer la conditions aux limites.

Cet ordre de convergence observé a ensuite été corroboré par un autre cas-test : un écoulement sub-sonique autour d'un cylindre. Des validations ont aussi été effectuées pour des écoulements supersoniques, autour d'un cylindre et dans un domaine à coin, pour lesquels les quantités significatives calculées sont en bon accord avec la littérature.

II.1.3.2 Profil NACA0012 transsonique

Le test d'un écoulement transsonique autour d'un profil NACA0012 a été réalisé avec $M_\infty = 0.8$ et un angle d'attaque $\alpha = 1.25^\circ$. Ce test est classique, cependant une solution précise est difficile à obtenir même si l'allure globale de l'écoulement peut être obtenue avec une grille de faible résolution (voir une discussion récente dans [162]). Ici la simulation est effectuée sur un domaine de taille $30c \times 20c$ avec c la corde du profil et $h = \frac{c}{100}$. Un zoom numérique est ensuite réalisé pour obtenir une résolution plus précise sur le profil : le résultat obtenu sur le domaine $30c \times 20c$ est interpolé sur les points de la frontière du domaine $[-c, 2c] \times [-c, c]$, avec $h = \frac{c}{200}$. Les contour de pression, du nombre de Mach et de la densité obtenus sont affichés sur la Figure II.4.

Une résolution encore plus précise a été nécessaire pour calculer les coefficients de portance et de traînée. Les résultats obtenus avec $h = \frac{c}{400}$ dans $[-c, 2c] \times [-c, c]$ sont détaillés et comparés à [162] dans le tableau II.1. Les résultats de référence sont obtenus avec des schémas sur des maillages adaptés, plus de 16 millions de points dans le domaine, et plus

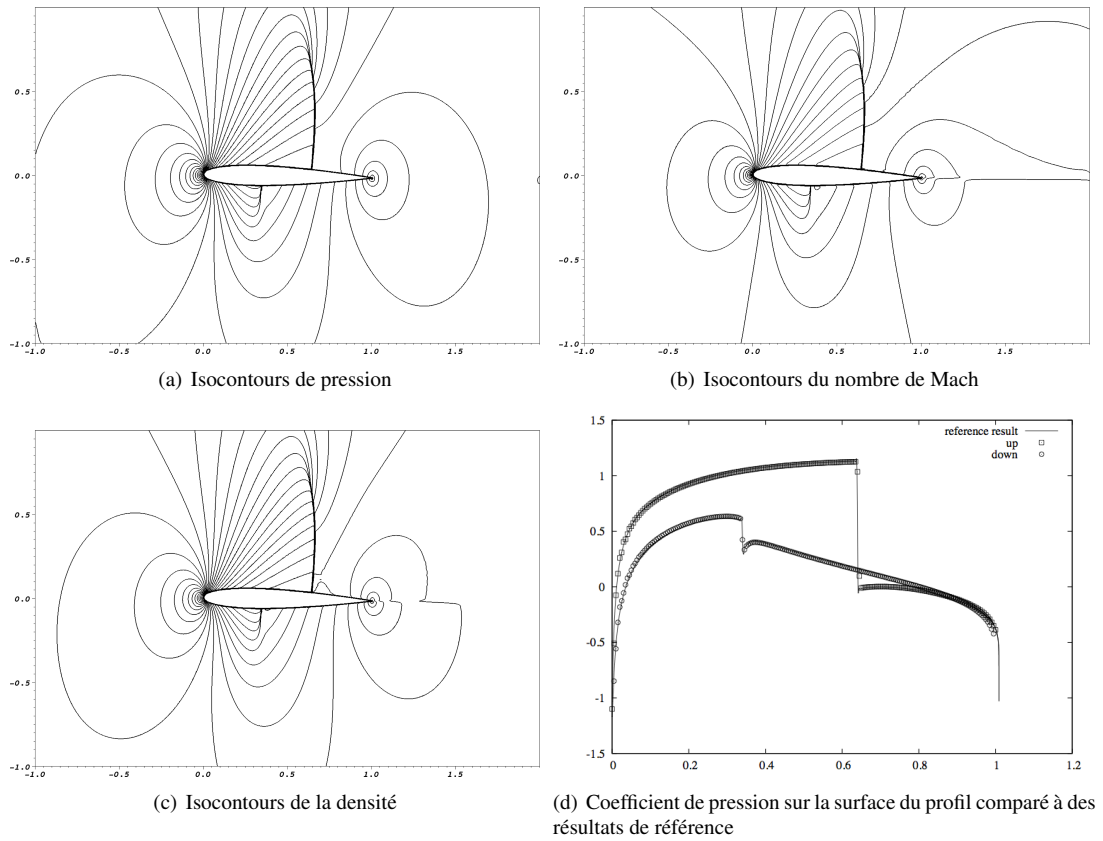


FIGURE II.4 – Écoulement autour d'un profil de NACA0012.

de 4000 points sur le profil. A noter que les derniers chiffres significatifs du coefficient de trainée dépendent fortement de la manière de représenter le bord de fuite du profil.

	Min [162]	Max [162]	Present
C_l	0.348226045	0.356208937	0.34951
C_d	0.022453440	0.022684938	0.02056

TABLE II.1 – Coefficients de portance et de trainée.

II.1.3.3 Profil oscillant

Il s'agit du cas test CT1 du rapport AGARD 702. Ici, le profil est immergé dans un écoulement à $M_1 = 0.6$ et son angle d'incidence oscille autour d'un angle d'incidence moyen. La simulation est effectuée avec le code parallélisé et une grille de 4800^2 points, ce qui correspond à 200 points sur la corde du profil. Le coefficient normal est calculé et comparé aux résultats expérimentaux sur la figure II.5. On constate que les résultats numériques sont assez proches de l'expérience. Une meilleure précision pourrait sans doute être atteinte avec un traitement plus précis des cellules passant de fluide à solide et réciproquement.

II.1.3.4 Choc à Mach 10 sur trois sphères

La méthode a aussi été implantée en 3D, parallélisée avec MPI, dans le cadre d'une collaboration avec Haysam Telib (Optimad Engineering). Des tests de scalabilité ont montré que le code affichait de bonnes performances en matière de speedup. On présente ici la simulation d'un choc planaire à Mach 10 sur trois sphères : voir Figure II.6. Les centres des sphères sont placés aux points $(0,0,0)$, $(-0.75, 1.4, -1.4)$, $(0,-2,0)$, avec comme rayons respectifs 1, 0.4, 0.3. La taille

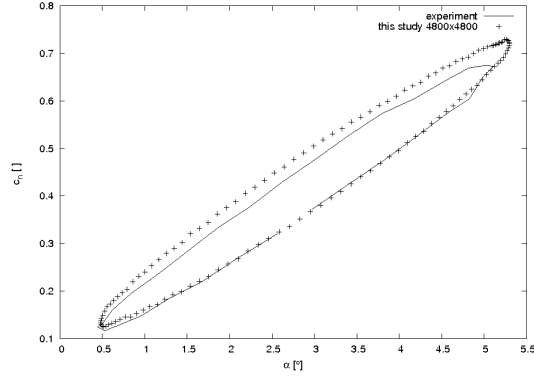


FIGURE II.5 – Profil oscillant : comparaison entre la force normale issue de la simulation et les données issues de l’expérience.

du domaine est $[-2.5; 2.5]^3$, discrétisé sur une grille de 256^3 points. Les réflexions sur les sphères font apparaitre des structures complexes dans le sillage des sphères.

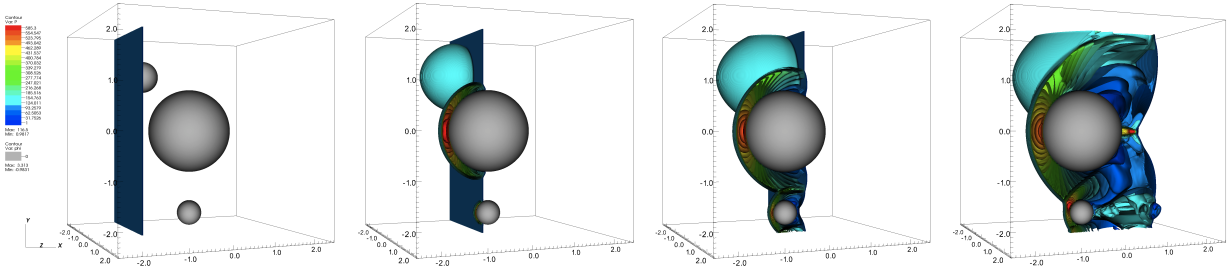


FIGURE II.6 – Choc planaire à Mach 10 sur trois sphères : 20 isosurfaces de pressions.

II.2 Condition aux limites génératrice pour les équations de Boussinesq

II.2.1 Contexte

Ce travail a été réalisé en collaboration avec David Lannes, un article est en cours de rédaction [105]. Les équations de Saint Venant non-linéaires constituent un modèle robuste utilisé dans de nombreuses applications : elles fournissent une approximation des équations d’Euler à surface libre avec une précision $O(\mu)$ [4, 88, 104], avec $\mu = H_0^2/L^2$, L la longueur caractéristique horizontale des vagues et H_0 la profondeur au repos. Elles peuvent s’écrire sous la forme conservative suivante :

$$\begin{cases} \partial_t \zeta + \partial_x q = 0, \\ \partial_t q + \partial_x \left(\frac{1}{2} g h^2 + \frac{1}{h} q^2 \right) = 0, \end{cases} \quad (\text{II.2.1})$$

avec ζ l’élévation de la surface au dessus de l’état de repos, q l’intégrale verticale de la vitesse horizontale et $h = H_0 + \zeta$ la profondeur d’eau totale.

Pour de nombreuses applications, l’élévation de la surface est connue à l’entrée du domaine

$$\forall t \geq 0, \quad \zeta(t, x = 0) = f(t) \quad (\text{II.2.2})$$

ainsi que les conditions initiales pour q et ζ :

$$\forall x \geq 0, \quad (q, \zeta)(t = 0, x) = (\zeta^0, q^0); \quad (\text{II.2.3})$$

ce type de conditions aux limites est souvent appelé condition aux limites *génératrice*.

Les équations (II.2.1) - (II.2.2) - (II.2.3) constituent un problème de nature hyperbolique qui peut être résolu théoriquement (par exemple [111, 140, 89]) et numériquement en utilisant la décomposition de la solution en invariants de Riemann (voir

par exemple [125]). Elles négligent toutefois les effets dispersifs qui jouent un rôle important dans les zones côtières. Pour prendre en compte ces effets, il faut rajouter les termes en $O(\mu^2)$ qui ont été négligés dans leur dérivation. Les modèles les plus simples prenant en compte ces termes sont les modèles de type Boussinesq, qui sont dérivés sous l'hypothèse que les vagues sont de faible amplitude par rapport à la profondeur, ce qui permet de négliger certains termes non-linéaires. Dans ce travail, nous avons considéré le modèle d'Abbott-Boussinesq [2, 68]

$$\begin{cases} \partial_t \zeta + \partial_x q = 0, \\ (1 - \frac{H_0^2}{3} \partial_x^2) \partial_t q + \partial_x (\frac{1}{2} g h^2 + \frac{1}{h} q^2) = 0, \end{cases} \quad (h = H_0 + \zeta) \quad (\text{II.2.4})$$

complété avec les conditions (II.2.2) - (II.2.3). Contrairement au cas des équations de Saint Venant (II.2.1), ce système n'est plus hyperbolique, et il n'y a pas de théorie générale pour le traiter. De part l'importance de cette problématique pour les simulations numériques en océanographie côtière, un certain nombre de travaux ont été dédiés ces dernières années à la recherche de méthodes numériques pour résoudre ce problème. Pour le problème apparenté des conditions aux limites transparentes (i.e. quelles conditions aux limites imposer sur la frontière du domaine pour que les ondes traversent cette frontière artificielle sans en être affectées), le problème linéaire a été étudié pour des équations scalaires comme Korteweg-de Vries ou Benjamin-Bona-Mahony dans [23, 24] ainsi que pour la linéarisation de (II.2.4) autour de l'état de repos. Dans le cas non-linéaire, une approche différente a été développée récemment, consistant à utiliser une PML (Perfectly Matched Layer) dans le cas des équations de Green-Naghdi [98]. Cette approche peut être utilisée pour traiter des conditions aux limites génératrices comme (II.2.2) mais la taille de la couche dans laquelle la PML est implantée est typiquement de l'ordre de deux longueurs d'onde, ce qui pour les applications en océanographie côtière peut représenter une augmentation de 100% de la taille du domaine de calcul.

Nous proposons une nouvelle approche pour résoudre numériquement le système des équations de Boussinesq non-linéaires (II.2.4) avec la condition aux limites génératrice (II.2.2) et la condition initiale (II.2.3), qui est très facile à implanter et qui ne requiert aucune extension de la taille du domaine de calcul. Elle repose sur une reformulation du problème (II.2.4)-(II.2.2)-(II.2.3) en un système de lois de conservation non-homogène pour ζ et q , avec un flux non-local et un terme source prenant en compte la présence d'une couche limite dispersive et dont le coefficient est obtenu par la résolution d'une EDO non-linéaire. Pour rendre plus claire la structure de la couche limite dispersive, on travaille dans la suite avec une version adimensionnée de (II.2.1).

On note a l'amplitude caractéristique des vagues, L leur longueur caractéristique, et on introduit les quantités sans dimension suivantes,

$$x' = \frac{x}{L}, \quad t' = \frac{t}{L/\sqrt{gH_0}}, \quad \zeta' = \frac{\zeta}{a}, \quad u' = \frac{u}{\frac{a}{H_0}\sqrt{gH_0}}, \quad h' = 1 + \varepsilon \zeta'.$$

En les injectant dans (II.2.4) (et en omettant les primes), on obtient la version adimensionnée des équations de Boussinesq

$$\begin{cases} \partial_t \zeta + \partial_x q = 0, \\ (1 - \frac{\mu}{3} \partial_x^2) \partial_t q + \partial_x (\frac{1}{2\varepsilon} h^2 + \varepsilon \frac{1}{h} q^2) = 0, \end{cases} \quad (\text{II.2.5})$$

où ε et μ sont respectivement appelés paramètres de *non-linéarité* et de *faible profondeur* et sont définis par

$$\varepsilon = \frac{a}{h}, \quad \mu = \frac{H_0^2}{L^2};$$

Les équations de Boussinesq sont dérivées sous les hypothèses

$$\mu \ll 1 \quad \text{and} \quad \varepsilon = O(\mu). \quad (\text{II.2.6})$$

II.2.2 Reformulation des équations

Par souci de clarté, on considère dans la suite le problème sur la demi-ligne $(0, \infty)$ afin de ne considérer que le traitement des conditions aux limites à gauche. Pour résoudre les équations (II.2.5) nous devons inverser l'opérateur $(1 - \frac{\mu}{3} \partial_x^2)$ sur la demi-ligne $(0, \infty)$ et nous avons donc besoin d'une condition aux limites sur $\partial_t q$ dont nous ne disposons pas a priori. Notre stratégie est d'utiliser l'inverse de l'opérateur $(1 - \frac{\mu}{3} \partial_x^2)$ avec des conditions aux limites de Dirichlet homogène, et de construire la couche limite dispersive correspondant au fait que la valeur sur la frontière de q n'est pas égale à zéro dans le cas général.

On note

$$\underline{q}(t) = q(t, x = 0),$$

et R_0 et R_1 les inverses de l'opérateur $(1 - \frac{\mu}{3} \partial_x^2)$ avec respectivement des conditions de Dirichlet ou des conditions de Neumann homogènes :

$$R_0 : \begin{array}{ccc} L^2(\mathbb{R}_+) & \rightarrow & H^2(\mathbb{R}_+) \\ f & \mapsto & u, \end{array} \quad \text{où} \quad \begin{cases} (1 - \frac{\mu}{3} \partial_x^2)u = f \\ u(0) = 0 \end{cases}$$

et

$$R_1 : \begin{array}{ccc} L^2(\mathbb{R}_+) & \rightarrow & H^2(\mathbb{R}_+) \\ f & \mapsto & v, \end{array} \quad \text{où} \quad \begin{cases} (1 - \frac{\mu}{3} \partial_x^2)v = f \\ \partial_x v(0) = 0 \end{cases}.$$

On introduit aussi l'opérateur \underline{R}_1 défini par

$$\underline{R}_1 : \begin{array}{ccc} L^2(\mathbb{R}_+) & \rightarrow & \mathbb{R} \\ f & \mapsto & (R_1 f)|_{x=0}. \end{array}$$

Lemma II.2.1. *Pour tout $f \in L^2(\mathbb{R}_+)$,*

$$R_0 \partial_x f = \partial_x R_1 f. \quad (\text{II.2.7})$$

Avec ces notations, la deuxième équation de (II.2.5) peut être écrite sous la forme équivalente

$$\partial_t q = -R_0 \partial_x \left(\frac{1}{2\varepsilon} h^2 + \varepsilon \frac{1}{h} q^2 \right) + \underline{q} \exp \left(-\frac{x}{\delta} \right) \quad (\text{II.2.8})$$

avec $\delta = \sqrt{\mu/3}$. En différenciant (II.2.8) par rapport à x , on obtient

$$\partial_t \partial_x q = -\partial_x R_0 \partial_x \left(\frac{1}{2\varepsilon} (h^2 - 1) + \varepsilon \frac{1}{h} q^2 \right) - \frac{1}{\delta} \underline{q} \exp \left(-\frac{x}{\delta} \right). \quad (\text{II.2.9})$$

Puis en utilisant la première équation de (II.2.5) pour remplacer $\partial_t \partial_x q$ par $\partial_t^2 \zeta$ et le lemme, on déduit de (II.2.9) que

$$-\partial_t^2 \zeta = -\partial_x^2 R_1 \left(\frac{1}{2\varepsilon} (h^2 - 1) + \varepsilon \frac{1}{h} q^2 \right) - \frac{1}{\delta} \underline{q} \exp \left(-\frac{x}{\delta} \right).$$

On remarque de plus que $-\partial_x^2 = \frac{1}{\delta^2} (1 - \frac{\mu}{3} \partial_x^2) - \frac{1}{\delta^2}$ et on rappelle que $(1 - \frac{\mu}{3} \partial_x^2) R_1 = \text{Id}$, ce qui permet d'obtenir

$$\partial_t^2 \zeta = \frac{1}{\delta^2} (R_1 - \text{Id}) \left(\frac{1}{2\varepsilon} (h^2 - 1) + \varepsilon \frac{1}{h} q^2 \right) + \frac{1}{\delta} \underline{q} \exp \left(-\frac{x}{\delta} \right).$$

La trace de cette expression en $x = 0$ nous fournit

$$\underline{\ddot{\zeta}} + \frac{1}{\delta^2} (1 + \frac{\varepsilon}{2} \underline{\zeta}) \underline{\zeta} = \frac{1}{\delta^2} [R_1 \left(\frac{1}{2\varepsilon} (h^2 - 1) + \varepsilon \frac{1}{h} q^2 \right)]|_{x=0} + \frac{1}{\delta} \underline{q} - \frac{\varepsilon}{\delta^2} \frac{q^2}{h},$$

En utilisant à nouveau le lemme pour remplacer $R_0 \partial_x$ par $R_1 \partial_x$ dans (II.2.8), il en résulte que les équations de Boussinesq adimensionnées (II.2.5) peuvent être écrites sous la forme équivalente

$$\begin{cases} \partial_t \zeta + \partial_x q = 0, \\ \partial_t q + \partial_x R_1 \left(\frac{1}{2\varepsilon} h^2 + \varepsilon \frac{1}{h} q^2 \right) = \underline{\mathcal{Q}}(\underline{q}, f, \underline{\ddot{f}}, \underline{\zeta}, q) \exp \left(-\frac{x}{\delta} \right), \\ \underline{\dot{q}} = \underline{\mathcal{Q}}(\underline{q}, f, \underline{\ddot{f}}, \underline{\zeta}, q), \end{cases} \quad (\text{II.2.10})$$

où

$$\underline{\mathcal{Q}}(\underline{q}, f, \underline{\ddot{f}}, \underline{\zeta}, q) = \frac{\varepsilon}{\delta} \frac{q^2}{1 + \varepsilon f} + \delta \underline{\ddot{f}} + \frac{1}{\delta} (1 + \frac{\varepsilon}{2} f) f - \frac{1}{\delta} R_1 \left(\frac{1}{2\varepsilon} (h^2 - 1) + \varepsilon \frac{1}{h} q^2 \right), \quad (\text{II.2.11})$$

avec la condition initiale

$$(\zeta, q)(t = 0, x) = (\zeta^0, q^0)(x), \quad \underline{q}(t = 0) = q^0(x = 0), \quad (\text{II.2.12})$$

et la condition aux limites

$$\zeta(t, x = 0) = f(t). \quad (\text{II.2.13})$$

II.2.3 Discrétisation des équations

On ré-écrit les deux premières équations de (II.2.10) sous la forme condensée

$$\partial_t U + \partial_x (F_\mu(U)) = S \quad (\text{II.2.14})$$

avec $U = (\zeta, q)^T$ et

$$F_\mu(U) = (q, f_\mu(U))^T, \quad (\text{II.2.15})$$

et

$$f_\mu(U) = R_1 f(U) \quad \text{et} \quad f(U) := \frac{1}{2\varepsilon}(h^2 - 1) + \varepsilon \frac{1}{h} q^2,$$

où $f(U)$ est le flux dans l'équation sur la quantité de mouvement pour les équations de Saint Venant non-linéaires (II.2.1) adimensionnées. Le flux dans l'équation (II.2.14) est donc un opérateur non-local. Le terme source S est donné par

$$S = \begin{pmatrix} 0 \\ \underline{Q}(q, f, \ddot{f}, \zeta, q) \exp(-\frac{x}{\delta}) \end{pmatrix}, \quad (\text{II.2.16})$$

avec $\underline{Q}(q, f, \ddot{f}, \zeta, q)$ défini dans (II.2.11). Les équations II.2.10 sont discrétisées avec un schéma de Lax-Friedrichs. Le flux non-local $R_1 f(U)$ est calculé avec des différences finies centrées d'ordre deux.

II.2.4 Validation numérique

Pour valider la méthode, nous calculons d'abord une solution U^L dans un domaine $[-L, L]$, avec des conditions aux limites de type "mur" ou périodiques. Puis nous définissons une solution de référence comme la restriction de U^L à $[0, L]$, avec une condition entrante f donnée par

$$U^{\text{ref}} = (\zeta^{\text{ref}}, q^{\text{ref}}) := \zeta^L|_{[0, L]} \quad \text{and} \quad f(t) := U^L(t, x = 0).$$

On utilise ensuite le schéma de la section II.2.3 pour calculer la solution U dans le domaine $[0, L]$ avec comme condition entrante f .

Les erreurs relatives $\mathbf{e}_{\delta_x}^\zeta(t)$ et $\mathbf{e}_{\delta_x}^q(t)$ sont définies par

$$\mathbf{e}_{\delta_x}^\zeta(t) = \frac{\|\zeta(t, \cdot) - \zeta^{\text{ref}}(t, \cdot)\|_{L^\infty(0, L)}}{\|\zeta^L(t = 0, \cdot)\|_{L^\infty(-L, L)}}, \quad \mathbf{e}_{\delta_x}^q(t) = \frac{\|q(t, \cdot) - q^{\text{ref}}(t, \cdot)\|_{L^\infty(0, L)}}{\|q^L(t = 0, \cdot)\|_{L^\infty(-L, L)}}, \quad (\text{II.2.17})$$

et on calcule les erreurs globales $e_{\delta_x}^\zeta$ et $e_{\delta_x}^q$ sur $[0, T_f]$ comme

$$e_{\delta_x}^\zeta = \|e_{\delta_x}^\zeta(\cdot)\|_{L^\infty(0, T_f)}, \quad e_{\delta_x}^q = \|e_{\delta_x}^q(\cdot)\|_{L^\infty(0, T_f)}.$$

Le premier test considère la propagation de deux gaussiennes initialement placées de manière asymétrique par rapport à la frontière du domaine, afin que sur la frontière soient présents à différents temps de la simulation les trois forçages correspondant à une onde essentiellement entrante, sortante, ou la superposition d'une entrante et une sortante.

La solution de référence est calculée sur un maillage très raffiné $n_x = 3600$, puis la solution avec le nouveau schéma est calculée sur des grilles plus grossières, pour différentes valeurs de μ et ε :

$$\text{(I)} \quad \varepsilon = \mu = 0.3, \quad \text{(II)} \quad \varepsilon = \mu = 0.1, \quad \text{(III)} \quad \varepsilon = \mu = 0.01,$$

les effets non-linéaires et dispersifs devenant de plus en plus importants quand ε et μ augmentent. Les résultats numériques montrent dans chaque cas une convergence à l'ordre un en norme L^∞ , voir II.6 et II.3.

Le deuxième test concerne la propagation d'un soliton. On observe aussi une convergence à l'ordre un de la solution obtenue avec la nouvelle méthode, comme illustré dans les tableaux II.4 et II.5. Sur la figure II.7 est illustrée la comparaison entre la solution numérique pour la variable ζ et la solution de référence pour le soliton après une propagation sur une distance $L = 10$.

n_x	$e_{\delta_x}^{\zeta}$	order	$e_{\delta_x}^q$	order
90	2.26×10^{-1}	-	2.15×10^{-1}	-
120	1.87×10^{-1}	0.67	1.66×10^{-1}	0.89
150	1.57×10^{-1}	0.71	1.35×10^{-1}	0.91
180	1.36×10^{-1}	0.74	1.13×10^{-1}	0.92
200	1.24×10^{-1}	0.75	1.02×10^{-1}	0.93
300	8.45×10^{-2}	0.82	6.67×10^{-2}	0.97
360	6.97×10^{-2}	0.85	5.45×10^{-2}	0.99

TABLE II.2 – Etude de convergence pour l'évolution de gaussiennes, $\mu = \varepsilon = 0.3$

n_x	$e_{\delta_x}^{\zeta}$	ordre	$e_{\delta_x}^q$	ordre
90	1.51×10^{-1}	-	2.40×10^{-1}	-
120	1.20×10^{-1}	0.78	1.88×10^{-1}	0.85
150	9.96×10^{-2}	0.82	1.55×10^{-1}	0.85
180	8.44×10^{-2}	0.84	1.31×10^{-1}	0.87
200	7.66×10^{-2}	0.85	1.19×10^{-1}	0.88
300	5.17×10^{-2}	0.89	7.97×10^{-2}	0.91
360	4.28×10^{-2}	0.91	6.56×10^{-2}	0.93

TABLE II.3 – Etude de convergence pour l'évolution de gaussiennes, $\mu = \varepsilon = 0.1$

n_x	$e_{\delta_x}^{\zeta}$	ordre	$e_{\delta_x}^q$	ordre
100	4.86×10^{-2}	-	5.40×10^{-2}	-
200	2.74×10^{-2}	0.82	3.04×10^{-2}	0.83
400	1.51×10^{-2}	0.84	1.67×10^{-2}	0.85
800	8.02×10^{-3}	0.87	8.88×10^{-3}	0.87
1200	5.47×10^{-3}	0.88	6.09×10^{-3}	0.88

TABLE II.4 – Etude de convergence pour la propagation d'un soliton, $\mu = \varepsilon = 0.3$

n_x	$e_{\delta_x}^{\zeta}$	order	$e_{\delta_x}^q$	order
100	4.20×10^{-2}	-	4.36×10^{-2}	-
200	2.53×10^{-2}	0.73	2.61×10^{-2}	0.74
400	1.44×10^{-2}	0.77	1.49×10^{-2}	0.78
800	7.81×10^{-3}	0.81	8.10×10^{-3}	0.81
1200	5.38×10^{-3}	0.83	5.58×10^{-3}	0.83

TABLE II.5 – Etude de convergence pour la propagation d'un soliton, $\mu = \varepsilon = 0.1$

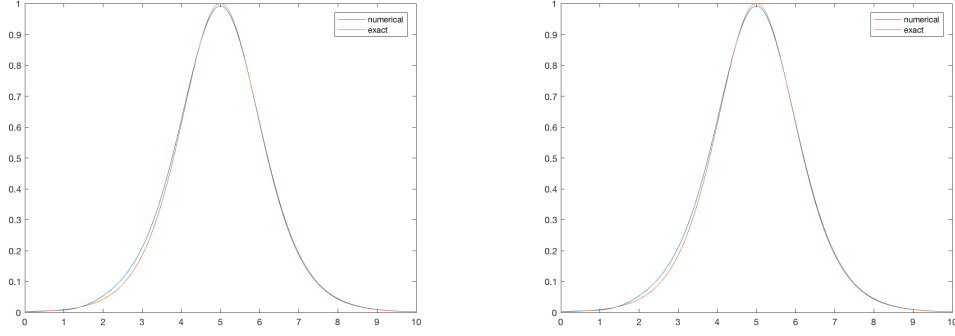


FIGURE II.7 – Comparaison entre la solution de référence pour le soliton et la solution numérique pour ζ sur le petit domaine au temps final, $n_x = 100$, gauche : $\mu = \varepsilon = 0.3$, droite : $\mu = \varepsilon = 0.1$.

II.3 Méthodes particulières pour des écoulements compressibles

Ce travail a été réalisé en collaboration avec Adrien Magni, alors doctorant sous la direction de Georges-Henri Cottet. Il a été publié sous forme d'un article [170] dans un journal.

Les méthodes particulières sont des méthodes numériques basées sur une formulation lagrangienne, initialement conçues pour des problèmes où l'advection joue un rôle dominant. Dans cette classe de méthodes, le fluide est discrétisé sous forme de petits éléments de masse (vorticité, quantité de mouvement, ...) concentrés sur des points : les particules, qui se déplacent de manière lagrangienne à la vitesse de l'écoulement. Les méthodes particulières classiques utilisées en mécanique des fluides compressible sont les méthodes Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) [131], [14], [74] introduites par Monaghan et les méthodes Particle-In-Cell (PIC) [82], [64].

De part leur déplacement lagrangien, les particules ont tendance à s'accumuler dans certaines zones, par exemple en présence de forts gradients ou de chocs, et à se raréfier dans d'autres, au fur et à mesure que le temps de la simulation augmente. Cette tendance occasionne une perte de précision, par exemple si l'on souhaite calculer des gradients à partir des valeurs portées par les particules. Un remède consiste à créer de nouvelles particules distribuées sur une grille uniforme, en distribuant de manière conservative les valeurs portées par les anciennes particules sur les points de la grille. Ce processus est couramment appelé "remaillage" des particules. Il est commode de le pratiquer à chaque pas de temps car il est alors facile de calculer des quantités telles que les gradients de pression, ou bien la diffusion, en se servant des valeurs sur la grille. Le pas de temps, dans le cas où les particules sont juste advectées n'est pas restreint par une condition CFL classique, mais par le fait que deux particules ne peuvent se croiser. Il est donc proportionnel à $\frac{1}{\|\nabla a\|_\infty}$ avec a la vitesse d'advection des particules.

Ces méthodes ont été étudiées et validées principalement pour des écoulements incompressibles [48] [100],[46] [128], mais également pour du transport de scalaires passifs [101] et pour des écoulement compressibles non-visqueux dans [166] et [37]. Dans cette dernière référence il est d'ailleurs constaté que pour simuler des instabilités hydrodynamiques dans un contexte astrophysique, la méthode particulière avec remaillage parvient mieux à reproduire la formation des instabilités qu'une méthode SPH standard, qui ne comporte aucune étape de remaillage.

Dans [50] des méthodes particulières avec remaillage avaient été ré-écrites sous la forme de schémas aux différences finies, avec un début d'analyse dans ce formalisme. Par exemple, la méthode particulière correspondant à un certain noyau d'interpolation d'ordre deux se révélait dans le cas d'un transport linéaire être équivalente au schéma de Lax-Wendroff, alors que dans le cas non-linéaire on obtenait un nouveau schéma, qui présentait numériquement de meilleures propriétés entropiques que le schéma de Lax-Wendroff. Puis dans [49] et [123] Cottet et Magni ont développé de nouvelles formules de remaillage TVD. Le travail présenté ici a consisté à étudier plus en détail les propriétés de consistance et de précision des méthodes particulières avec remaillage, ainsi que les propriétés de convergence vers la solution entropique dans le cas des nouvelles formules de remaillage TVD introduites par Cottet et Magni. Notons que dans [47] ont été réalisées plus récemment une dérivation systématique de formules de remaillage d'ordre arbitrairement élevé, leur analyse de consistance et de stabilité dans le cas d'un transport linéaire, et leur implantation sur GPU.

On se place dans le cas d'une équation de transport non-linéaire scalaire dans un domaine infini :

$$\partial_t u + \partial_x(g(u)u) = 0, \quad t \geq 0, \quad -\infty < x < +\infty. \quad (\text{II.3.1})$$

On transforme cette équation en utilisant la dérivée lagrangienne associée à la vitesse matérielle $g(u)$ pour obtenir

$$\frac{du}{dt} + \partial_x(g(u))u = 0.$$

Soit $V(t)$ un volume matériel qui se déplace en tout point à la vitesse du fluide. En appliquant le théorème de Reynolds on obtient

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{V(t)} u dV \right) = \int_{V(t)} \frac{du}{dt} dV + \int_{V(t)} u \partial_x(g(u)) dV = 0.$$

La quantité de u portée dans le volume $V(t)$ est donc constante au cours du temps. La discrétisation avec une méthode particulaire revient à découper le fluide en petites masses concentrées sur des points qu'on appelle les particules. Une particule j a une position x_j et porte la quantité constante au cours du temps $m_j = V_j u_j$, avec V_j le volume de la particule, initialement égal au pas d'espace de la grille Δx , et se déplace à la vitesse $g(u)_j$ qui est une approximation de la vitesse $g(u)$ au cours du pas de temps. Cela correspond aux équations suivantes

$$\begin{aligned} \frac{dm_j}{dt} &= 0, \\ \frac{dx_j}{dt} &= g(u)_j. \end{aligned}$$

Pour résoudre ce système on advecte les particules pendant un pas de temps puis on projette les quantités m_j sur la grille sous-jacente uniforme, en utilisant un noyau d'interpolation dont on présente le principe ci-dessous :

Soit une distribution de particules identifiées par l'indice q , situées en x_q et portant les quantités m_q , et soit W un noyau d'interpolation. Les nouvelles quantités \tilde{m}_j situées sur les points de grille \tilde{x}_j sont calculées à partir des anciennes valeurs avec la formule

$$\tilde{m}_j = \sum_q m_q W\left(\frac{\tilde{x}_j - x_q}{\Delta x}\right). \quad (\text{II.3.2})$$

Avec une analyse de Fourier on peut montrer que l'ordre de l'interpolation ainsi réalisée est égal au nombre de moments préservés par la nouvelle distribution de particules, c'est-à-dire

$$\begin{aligned} \sum_i \tilde{m}_i &= \sum_q m_q, \\ \sum_i \tilde{m}_i (x - \tilde{x}_i) &= \sum_q m_q (x - x_q), \\ \sum_i \tilde{m}_i (x - \tilde{x}_i)^2 &= \sum_q m_q (x - x_q)^2. \\ &\dots \end{aligned}$$

Cette propriété est vraie jusqu'à l'ordre $M - 1$ si le noyau W vérifie (voir section 7.2 dans [48])

$$\sum_i W\left(\frac{x - \tilde{x}_i}{\Delta x}\right) \tilde{x}_i^a = x^a \text{ pour tout } x \text{ and } 0 \leq a \leq M - 1. \quad (\text{II.3.3})$$

Les noyaux d'interpolation couramment utilisés dans la littérature sont symétriques afin de ne pas favoriser une direction par rapport à une autre, et très souvent le remaillage en plusieurs dimensions est effectué soit en utilisant un produit tensoriel de noyaux d'interpolation en une dimension, soit en pratiquant un splitting dimensionnel pour l'advection et le remaillage. Des familles de noyaux d'interpolation, très souvent polynomiales par morceaux, peuvent être construites en imposant la conservation d'un certain nombre de moments et/ou en imposant des propriétés additionnelles de régularité du noyau. Nous renvoyons au livre [48] pour plus de détails.

II.3.1 Consistance et précision des méthodes particulaires avec remaillage

Pour tenir compte de la discrétisation en temps, on note x_j^n la position de la particule j , u_j^n la valeur de u portée par la particule au temps $n \Delta t$ et $g(u)_j^n$ la vitesse utilisée pour déplacer la particule entre les temps $n \Delta t$ and $(n + 1) \Delta t$.

Proposition 1 (Ecriture sous forme d'un schéma aux différences finies). *Si on note W le noyau d'interpolation utilisé, on peut exprimer la méthode particulière avec remaillage sous la forme*

$$u_j^{n+1} = \sum_i u_i^n W(j-i - \frac{\Delta t}{\Delta x} \tilde{g}(u)_i^n). \quad (\text{II.3.4})$$

On reconnaît donc la forme d'un schéma de type différences finies ou volumes finis. Monaghan [130] avait auparavant déjà remarqué une similarité entre méthodes particulières et différences finies. Dans [54], Wee et Ghoniem ont utilisé une analyse semblable pour construire des noyaux d'interpolation prenant en compte des termes de diffusion. La formule (II.3.4) est un peu obscure telle quelle, car les poids associés aux valeurs u_i^n sont exprimés en fonction du noyau d'interpolation W , dont on ne connaît pas la forme a priori. On peut néanmoins en déduire des informations sur la consistance et l'erreur d'approximation uniquement avec la connaissance du nombre de moments préservés par W :

Proposition 2 (Consistance aux sens des volumes finis). *Soit W un noyau d'interpolation polynomial par morceaux de degré N à support compact préservant au moins les deux premiers moments. Le schéma (II.3.4) peut s'écrire sous forme conservative consistante avec l'équation (II.3.1).*

Il est crucial que le schéma numérique puisse être écrit sous forme conservative consistante avec l'équation à résoudre quand on considère un écoulement où des chocs peuvent apparaître, car cette propriété assure que le schéma vérifie des relations de Rankine-Hugoniot discrètes au travers des discontinuités, et donc, si le schéma converge, c'est nécessairement vers une solution faible du problème considéré, ce qui n'est pas forcément le cas pour un schéma qui ne peut pas s'écrire sous forme conservative.

Pour des raisons pratiques de temps de calcul, les noyaux d'interpolation usuels sont tous à support compact, et on peut distinguer ceux dont la taille du support est un entier pair (comme par exemple les noyaux Λ_1 , Λ_3 , M_4 and M'_4), et ceux dont la taille du support est un entier impair (comme par exemple les noyaux Λ_2 and M_3). On les appelle donc dans la suite noyaux pairs ou impairs. Le stencil du schéma II.3.4 pour un noyau pair varie suivant le signe de la vitesse des particules, Cela entraîne un manque de consistance du schéma aux différences finies qui en résulte dans le cas où la vitesse change de signe, comme cela est montré dans [123]. Au contraire, les noyaux impairs sont définis sur des intervalles de type $[k - 1/2, k + 1/2]$, et sous une condition CFL $|g(u_j) \frac{\Delta t}{\Delta x}| < \frac{1}{2}$ ne souffrent pas de ce manque de consistance. On s'occupe donc dans la suite uniquement de noyaux impairs.

Proposition 3 (Précision). *Soit W un noyau d'interpolation impair, polynomial par morceaux de degré N , qui conserve les M premiers moments, et u une solution de (II.3.1). Si on suppose que les fonctions u et \tilde{g} sont au moins de classe C^{M-1} , et que la condition $|g(u_j) \frac{\Delta t}{\Delta x}| < \frac{1}{2}$ est respectée, alors u_j^{n+1} défini par (II.3.4) vérifie*

$$u_j^{n+1} = \sum_{i=0}^{M-1} \frac{\Delta t^i}{i!} (-1)^i \frac{\partial^i (u \tilde{g}^i)}{\partial x^i} (j\Delta x, n\Delta t) + O(\Delta x^M). \quad (\text{II.3.5})$$

Cette propriété est également satisfaite par des noyaux à support pair si le signe de la vitesse des particules est constant.

Les preuves des propositions 2 et 3 reposent sur des développements en série de Taylor de la formule (II.3.4) combinés à l'utilisation des propriétés de conservation des moments du noyau d'interpolation.

La précision de la méthode particulière dépend de la précision du noyau d'interpolation utilisé. Dans le cas d'une advection linéaire, si le noyau d'interpolation conserve les M premiers moments, alors la méthode particulière a une erreur d'approximation d'ordre $M - 1$. Dans le cas non-linéaire, la formule (II.3.5) nous permet d'évaluer la précision de la méthode particulière vis à vis des pas d'espace et de temps. On suppose que Δx et Δt sont proportionnels. Si on prend $\tilde{g}(u) = g(u)$, l'erreur de troncature E_j^{n+1} est

$$\begin{aligned} E_j^{n+1} &= \frac{u(j\Delta x, (n+1)\Delta t) - u_j^{n+1}}{\Delta t} \\ &= \partial_t u(j\Delta x, n\Delta t) + \frac{\Delta t}{2} \partial_{tt} u(j\Delta x, n\Delta t) + \partial_x(g(u)u)(j\Delta x, n\Delta t) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \partial_{xx}(g(u)^2 u)(j\Delta x, n\Delta t) + O(\Delta x^2) + O(\Delta t^2) \\ &= O(\Delta t). \end{aligned}$$

Le schéma est donc d'ordre un même si le noyau d'interpolation préserve davantage de moments, à cause du terme non-nul $\partial_{tt}u - \partial_{xx}(g(u)^2u)$. En effet, le choix $\tilde{g}(u) = g(u)$ consiste à déplacer la particule pendant le pas de temps Δt avec sa vitesse évaluée au début du pas de temps

$$\tilde{x}_j = x_j + \Delta t g(u_j).$$

Il s'agit d'un schéma d'Euler explicite d'ordre un et donc le déplacement de la particule est d'ordre un. Dans [50] avait été proposé un déplacement d'ordre deux des particules, en utilisant une approximation d'ordre deux de la vitesse des particules au milieu du pas de temps :

$$\tilde{g}(u)_j = g\left(u + \frac{\Delta t}{2} \frac{du}{dt}\right)_{x=x_j}. \quad (\text{II.3.6})$$

Proposition 4 (Correction de la vitesse). *Pour des solutions suffisamment régulières, le schéma particulaire (II.3.4) utilisé avec la vitesse corrigée (II.3.6) est d'ordre deux si le noyau d'interpolation Λ conserve au moins les trois premiers moments.*

II.3.2 Méthodes particulières TVD pour des lois de conservation non-linéaires

II.3.2.1 Rappel de la construction des formules de remaillage TVD

Cottet et Magni ont développé dans [49] et [123] une technique de limiteurs de flux pour les noyaux d'interpolation, afin d'obtenir des formules de remaillage TVD. On rappelle ici le principe de ces nouvelles formules de remaillage.

On note $\lambda = \frac{\Delta t}{\Delta x}$. On suppose tout d'abord que la vitesse des particules \tilde{g} est positive et vérifie $0 < \lambda \tilde{g} < 1/2$. Le noyau d'interpolation Λ_2 , qui est un noyau d'interpolation classique permettant d'obtenir une précision d'ordre deux, redistribue les quantités portées par une particule sur les points de grille proportionnellement aux poids

$$\begin{cases} \alpha(y_j) &= \alpha_j = y_j(y_j - 1)/2 \\ \beta(y_j) &= \beta_j = 1 - y_j^2 \\ \gamma(y_j) &= \gamma_j = y_j(y_j + 1)/2 \end{cases} \quad (\text{II.3.7})$$

ainsi qu'illustré Figure II.8, où $y_j = \lambda \tilde{g}_j$ est la distance entre la particule j et le point de grille à sa gauche. Le schéma

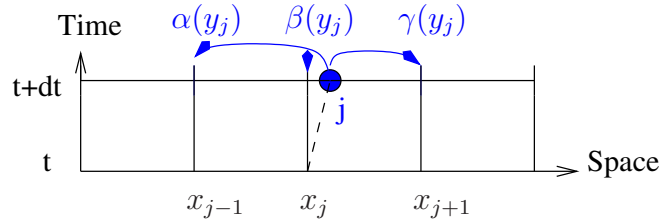


FIGURE II.8 – Remaillage avec Λ_2 , $0 < \lambda \tilde{g} < 1/2$.

résultant de cette formule de remaillage sur le point x_j s'écrit

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= \sum_k u_{j+k}^n \Lambda_2(k + \lambda \tilde{g}_{j+k}) \\ &= \gamma_{j-1} u_{j-1}^n + \beta_j u_j^n + \alpha_{j+1} u_{j+1}^n. \end{aligned} \quad (\text{II.3.8})$$

Si la vitesse est négative ($-1/2 < \lambda \tilde{g} < 0$), comme illustré sur la Figure II.9, alors les poids deviennent

$$\begin{cases} \alpha'(y_j) &= \alpha(y_j - 1) \\ \beta'(y_j) &= \beta(y_j - 1) \\ \gamma'(y_j) &= \gamma(y_j - 1) \end{cases} \quad (\text{II.3.9})$$

et le schéma s'écrit

$$u_j^{n+1} = \gamma'_{j-1} u_{j-1}^n + \beta'_j u_j^n + \alpha'_{j+1} u_{j+1}^n. \quad (\text{II.3.10})$$

Les formules (II.3.8) et (II.3.10) sont équivalentes car $y_j = \lambda \tilde{g}_j + 1$, et donc on peut définir un unique schéma sur le point x_j . L'inconvénient de ce schéma est qu'il n'est pas TVD. Pour obtenir un schéma TVD, on peut introduire de la diffusion

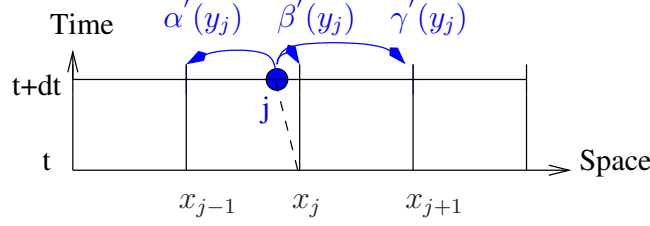


FIGURE II.9 – Remaillage avec Λ_2 , $-1/2 < \lambda \tilde{g} < 0$.

numérique dans (II.3.8) en ajoutant un paramètre σ dans les formules (II.3.7)-(II.3.9). La nouvelle formule qui en résulte (II.3.11) est appelée \bar{M}_3 . Elle préserve les deux premiers moments et donne donc un schéma d'ordre un. La valeur de σ est évaluée de manière à assurer le caractère TVD de \bar{M}_3 .

$$\begin{cases} \alpha^{M_3}(y_j) &= y_j(y_j - 1)/2 + \sigma, & \alpha^{M_3'}(y_j) &= \alpha^{M_3}(y_j - 1) \\ \beta^{M_3}(y_j) &= 1 - y_j^2 - 2\sigma, & \beta^{M_3'}(y_j) &= \beta^{M_3}(y_j - 1) \\ \gamma^{M_3}(y_j) &= y_j(y_j + 1)/2 + \sigma, & \gamma^{M_3'}(y_j) &= \gamma^{M_3}(y_j - 1). \end{cases} \quad (\text{II.3.11})$$

Pour obtenir des formules de remaillage TVD mais d'ordre deux dans les régions régulières, on combine les noyaux \bar{M}_3 et Λ_2 en utilisant un limiteur ϕ . On obtient ainsi les poids suivant pour le remaillage, si $0 < \lambda \tilde{g} < 1/2$:

$$\begin{cases} \alpha^{TVD}(y_j, \phi) &= y_j(y_j - 1)/2 + \sigma(1 - \phi_{j-1/2}) \\ \beta^{TVD}(y_j, \phi) &= 1 - y_j^2 - \sigma(1 - \phi_{j-1/2}) - \sigma(1 - \phi_{j+1/2}) \\ \gamma^{TVD}(y_j, \phi) &= y_j(y_j + 1)/2 + \sigma(1 - \phi_{j+1/2}), \end{cases} \quad (\text{II.3.12})$$

et si $-1/2 < \lambda \tilde{g} < 0$:

$$\begin{cases} \alpha^{TVD'}(y_j, \bar{\phi}) &= \alpha^{TVD}(y_j - 1, \bar{\phi}) \\ \beta^{TVD'}(y_j, \bar{\phi}) &= \beta^{TVD}(y_j - 1, \bar{\phi}) \\ \gamma^{TVD'}(y_j, \bar{\phi}) &= \gamma^{TVD}(y_j - 1, \bar{\phi}). \end{cases} \quad (\text{II.3.13})$$

II.3.2.2 Extension en cas de changement de signe de la vitesse

Avec Adrien Magni, nous avons étudié comment étendre ces formules de remaillage TVD au cas de lois de conservation non-linéaires avec un signe quelconque de la vitesse des particules. Nous avons explicité les formules de remaillage à utiliser dans le cas d'un changement de signe de la vitesse pour rester consistant et conservatif et montré que le remaillage restait bien TVD dans ce cas.

Nous avons produit des formules explicites pour les limiteurs et la condition CFL associée dans le cas de l'équation de Burgers et des équations d'Euler en une dimension. Nous avons validé numériquement ces nouvelles méthodes particulières TVD pour les équations d'Euler en une dimension sur le cas du tube à chocs de Sod. Les résultats numériques montrent que les oscillations qui étaient observées près des discontinuités par exemple dans [166] avec l'usage de noyaux d'interpolation classiques non TVD disparaissent avec ces formules de remaillage TVD.

II.3.2.3 Convergence vers la solution entropique

Nous avons ensuite étudié la convergence de ces méthodes particulières TVD vers l'unique solution entropique de (II.3.1). On considère ici la méthode particulière TVD construite avec les noyaux d'interpolation Λ_2 et \bar{M}_3 . Cependant les deux noyaux d'interpolation utilisés pourraient être n'importe quel noyau d'interpolation préservant au moins les deux premiers moments et donnant lieu à des formules de remaillage TVD, et n'importe quel autre noyau d'interpolation d'ordre plus élevé, tant que la combinaison de leurs flux est bien TVD et consistante. On note $G_{j+1/2}^2$ le flux du noyau Λ_2 et $\bar{G}_{j+1/2}^3$ le flux du noyau \bar{M}_3 . On suppose que le déplacement des particules est effectué à l'ordre deux, ainsi que décrit précédemment, afin d'obtenir une méthode particulière qui est globalement d'ordre deux. Le schéma peut s'écrire

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \lambda [(1 - \phi_{j+1/2}) G_{j+1/2}^2 + \phi_{j+1/2} \bar{G}_{j+1/2}^3 - (1 - \phi_{j-1/2}) G_{j-1/2}^2 - \phi_{j-1/2} \bar{G}_{j-1/2}^3].$$

En utilisant l'expression des flux en fonction des noyaux d'interpolation obtenue dans la preuve de la Proposition 2, on peut ré-écrire cette méthode particulière sous la forme

$$u_j^{n+1} = \sum_{k=-d}^d u_{j+k}^n \bar{\Lambda}(k, \varphi_{j-1/2}, \varphi_{j+1/2}, \lambda \tilde{g}_{j+k}). \quad (\text{II.3.14})$$

Les poids de la formule de remaillage dépendent donc des valeurs des particules voisines, au travers de l'usage du limiteur φ .

Proposition 5 (Convergence vers la solution entropique). *On suppose que la condition initiale u_0 de l'équation (II.3.1) a sa variation totale bornée : $TV(u_0) < +\infty$ et est bornée en norme L^∞ , et que la fonction g est de classe $C^1(\mathbb{R})$. La méthode particulière définie par (II.3.14), construite comme une combinaison TVD des noyaux Λ_2 et \bar{M}_3 et satisfaisant les conditions CFL*

$$\lambda |\tilde{g}(u_k^n)| < 1/2 \text{ et } \lambda |g(u_k^n)| < 1/2 \quad \forall (k, n),$$

converge en norme L^1_{loc} vers l'unique solution entropique de (II.3.1).

La preuve consiste d'abord à montrer que le schéma particulière est stable en norme $L^\infty(\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R})$, et que sa variation totale est bornée sur tout ouvert $\Omega \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}$. On applique ensuite un raisonnement par l'absurde : on suppose que le schéma particulière ne tend pas vers dans $L^1(\Omega)$ vers u l'unique solution entropique de (II.3.1). Dans ce cas, on peut en extraire une sous-suite qui converge vers une solution faible de (II.3.1). On montre, en s'inspirant de techniques issues de [124] que cette solution faible vérifie une inégalité d'entropie faible pour toutes les entropies de Kruzkov.

Pour cela, on utilise une version discrète de l'inégalité entropique qu'on passe à la limite en tirant parti de la forme particulière de la méthode particulière, c'est-à-dire du fait que la solution au temps $n+1$ est exprimée comme une somme pondérée des valeurs locales de la solution u^n au temps n . Cette solution faible est donc l'unique solution entropique de (II.3.1), ce qui est en contradiction avec la supposition initiale.

Des preuves de convergence pour des méthodes particulières avaient été établies dans [132], [106] et [107] pour plusieurs méthodes de type SPH, qui sont des méthodes particulières purement lagrangiennes, sans étape de remaillage. Par contre, la preuve présentée ici est à notre connaissance, la seule pour des méthodes particulières avec remaillage et des lois de conservation scalaires non-linéaires. Grâce au processus de limitation des flux, elle s'applique également à des méthodes d'ordre plus élevé que ceux des références ci-dessus, dans lesquelles les noyaux étaient positifs et ne pouvaient donc réaliser que des interpolations linéaires.

II.4 Transport optimal

Ce travail a été réalisé avec Afaf Bouharguane et Angelo Iollo et publié dans [28], et son application à la nage de poisson dans un proceeding de conférence [18]. Le but était de proposer une méthode numérique pour résoudre rapidement un problème de transport optimal entre des densités assez proches, comme par exemple dans le cas d'images prises à des intervalles de temps proches.

Le principe de la résolution d'un problème de transport optimal est de déterminer une application qui transporte une densité vers une autre densité en minimisant une certaine fonction de coût. Soient $\rho_0(\xi), \rho_1(x)$ deux densités non-négatives suffisamment régulières et à supports compacts nommés Ω_0 et Ω_1 , avec $\xi, x \in \mathbb{R}^d$ et d la dimension d'espace. On suppose que

$$\int_{\Omega_0} \rho_0(\xi) d\xi = \int_{\Omega_1} \rho_1(x) dx.$$

Soit $X : \Omega_0 \rightarrow \Omega_1$ une application régulière telle que $X(\xi)$ réalise le transfert de ρ_0 sur ρ_1 , et donc telle que l'équation jacobienne suivante soit satisfaite :

$$\rho_0(\xi) = \det(\nabla X(\xi)) \rho_1(X(\xi)). \quad (\text{II.4.1})$$

Une solution est sélectionnée parmi toutes les application possibles en introduisant la distance L^2 de Kantorovich-Wasserstein :

$$\inf_X \int_{\Omega_0} \rho_0(\xi) |X(\xi) - \xi|^2 d\xi. \quad (\text{II.4.2})$$

Le problème L^2 de Monge-Kantorovich (MKP) revient à trouver une application X^* telle que cet infimum est atteint. Il a été prouvé que ce problème admet une unique solution [34, 164, 165], qui se trouve être le gradient d'une fonction convexe presque partout $\Psi : \Omega_0 \rightarrow \mathbb{R}$:

$$X^*(\xi) = \nabla \Psi(\xi). \quad (\text{II.4.3})$$

Sans entrer en détail dans la bibliographie sur ce sujet, la résolution numérique de ce problème a attiré beaucoup d'attention ces dernières années, et pose encore des défis en terme de temps de calcul et de précision. Benamou et Brenier ont proposé de résoudre le problème de transport optimal au moyen d'une méthode de Lagrangien augmenté, en utilisant une interprétation dans un cadre de la mécanique des fluides [13]. Dans leur formulation, une dimension temporelle est introduite, si bien que résoudre le problème MKP revient à trouver la solution de

$$\inf_{\rho, v} \int_{\mathbb{R}^d} \rho(t, x) |v(t, x)|^2 dx,$$

où l'infimum est pris parmi toutes les densités $\rho(t, x) \geq 0$ et champs de vitesse $v(t, x) \in \mathbb{R}^d$ qui satisfont l'équation de continuité

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho v) = 0,$$

et les conditions initiale et finale :

$$\rho(0, \cdot) = \rho_0, \quad \rho_1(1, \cdot) = \rho_1.$$

Cette méthode converge de manière robuste vers l'unique solution du problème de minimisation, même en cas de grands déplacements de masse, comme montré dans [137]. Cependant, le temps de calcul avec cette méthode est très long car la méthode nécessite la résolution à chaque itération d'une équation de Poisson de dimension $N+1$, où N est la dimension de l'espace physique.

Dans un travail récent, Saumier et al. [148] ont proposé un algorithme de Newton pour résoudre le problème L^2 de Monge-Kantorovich pour des densités périodiques régulières bornées loin de zéro. Cette méthode est une extension du schéma proposé par Loeper et Rapetti [120] pour la solution de (II.4.1) sur un tore avec $\nabla \Psi(\xi)$ à la place de $X(\xi)$, pour lequel la convergence est prouvée. Le principe de cette méthode repose sur une technique de point fixe à partir d'une version linéarisée du problème de transport optimal, qui permet d'obtenir, via la résolution d'une équation elliptique, une approximation du potentiel dont dérive le transport. La convergence de cet algorithme de Newton repose sur l'hypothèse que les densités initiales et finales sont bornées et que leur minimum est strictement supérieur à zéro, car le paramètre de relaxation de l'algorithme de Newton devient de plus en plus petit quand les valeurs de la densité s'approchent de zéro dans une zone du domaine.

Nous avons proposé une méthode numérique qui est une extension du travail de Saumier et al., pour des densités suffisamment régulières mais à support compact. Cette méthode repose sur une approche de continuation qui part d'un relèvement constant des densités considérées, afin que leur support ne soit plus compact, puis le réduit progressivement. Deux variantes ont été développées : un schéma lagrangien qui est une extension directe de la méthode de [120, 148], et une méthode eulérienne basée sur une méthode particulière avec remaillage, en utilisant le formalisme de mécanique continue de Benamou et Brenier.

II.4.1 Méthode itérative

II.4.1.1 Approche Lagrangienne

On suppose qu'on dispose à l'itération n de l'algorithme d'une approximation X^n qui est une perturbation du mapping optimal $X_o(\xi) = \nabla_\xi \Psi_o$:

$$X^n(\xi) = \nabla_\xi \Psi_o + \nabla_\xi \Psi_\varepsilon^n.$$

où l'erreur Ψ_ε^n vérifie $\|\Psi_\varepsilon^n\|_2 \approx \varepsilon$.

On définit $\rho_0^n(\xi)$ comme la densité initiale qui, transportée par $X^n(\xi)$ donnerait la densité finale exacte $\rho_1(x)$. En faisant une expansion de Taylor à l'ordre un, on peut écrire

$$\begin{aligned} \rho_0^n(\xi) &:= \rho_1(X^n(\xi)) \det(\nabla_\xi X^n(\xi)) \\ &= \underbrace{\rho_1(X_o) \det(\nabla_\xi X_o)}_{=\rho_0(\xi)} + \det(\nabla_\xi X_o) \left(\rho_1(X_o) \text{Tr} \left((\nabla_\xi X_o)^{-1} \nabla_\xi^2 \Psi_\varepsilon^n \right) + \nabla_x \rho_1(X_o) \cdot \nabla_\xi \Psi_\varepsilon^n \right) + o(\varepsilon), \end{aligned}$$

A l'ordre un en ε , nous obtenons l'équation suivante, qu'on utilise pour résoudre $\nabla \Psi_\varepsilon^n$

$$\frac{\rho_0^n(\xi) - \rho_0(\xi)}{\det(\nabla_\xi X_o)} \approx \rho_1(X_o) \text{Tr} \left((\nabla_\xi X_o)^{-1} \nabla_\xi^2 \Psi_\varepsilon^n \right) + \nabla_x \rho_1(X_o) \cdot \nabla_\xi \Psi_\varepsilon^n \quad (\text{II.4.4})$$

Le nouveau transport est obtenu par

$$X^{n+1} = X^n - \alpha \nabla \Psi_\varepsilon^n,$$

où α représente un coefficient d'amortissement. Dans [120, 148] il est montré que pour des valeurs de α suffisamment petites cet algorithme converge, quand les distributions ρ_0 et ρ_1 sont suffisamment régulières, périodiques et bornées inférieurement par une constante strictement positive. Pour approximer le problème, on discrétise l'équation (II.4.4) par des différences finies d'ordre deux classiques sur une grille cartésienne avec des conditions aux limites de Dirichlet homogènes. Le transport de masse est assuré par l'équation de continuité en coordonnées lagrangiennes.

Quand le support des densités initiale et finale tend à être compact, le paramètre α de la méthode de Newton devient beaucoup trop petit pour assurer la convergence en pratique [120, 148]. Dans ces cas il est possible de tout de même résoudre le problème en utilisant une approche par continuation. L'idée est d'ajouter aux densités initiale et finale une constante ζ telle que leur distance de Wasserstein soit réduite et que l'algorithme de Newton converge. Cette constante est ensuite itérativement ramenée à $O(10^{-3})$ pour des densités initiale et finale unitaires, en résolvant à chaque fois un problème de transport optimal avec pour approximation initiale la solution pour le ζ précédent. En pratique, comme les densités initiale et finale du problème sans le relèvement ζ ont un support compact, les conditions aux limites imposées sur les bords du domaine de calcul n'ont pas d'influence significative sur la solution quand ζ tend vers 0. Cette approche par continuation est aussi utilisée dans la version eulérienne de la méthode qui est décrite dans la prochaine sous-section.

II.4.1.2 Approche eulérienne

Dans le cadre proposé dans [13], la solution du problème L^2 de Monge-Kantorovich consiste à déterminer la vitesse initiale $u(0, \cdot) = u_0$ telle que

$$\partial_t(\rho) + \nabla \cdot (\rho u) = 0, \quad (\text{II.4.5})$$

$$\partial_t(\rho u) + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) = 0, \quad (\text{II.4.6})$$

$$\rho(0, \cdot) = \rho_0, \quad \rho(1, \cdot) = \rho_1. \quad (\text{II.4.7})$$

La vitesse initiale optimale u_0 s'écrit sous la forme $u_0 = \nabla \Psi$, où le potentiel Ψ est le multiplicateur de Lagrange des contraintes (II.4.5) et (II.4.7).

Le principe de notre algorithme est de partir d'une supposition initiale pour u_0 , et de résoudre numériquement les équations II.4.5-II.4.6 avec comme condition initiale pour la densité $\rho(0, \cdot) = \rho_0$. On obtient à l'issue du calcul une densité finale $\tilde{\rho}_1$ qui est a priori différente de ρ_1 , et un champ de vitesse final \tilde{u}_1 . L'étape suivante est de trouver une correction du champ de vitesse issue d'un potentiel qui transporte la donnée $\tilde{\rho}_1$ sur ρ_1 . Pour trouver ce champ de vitesse additionnel, on approxime l'équation de continuité II.4.5 par le problème elliptique suivant :

$$\nabla \cdot \left(\frac{\rho_1 + \tilde{\rho}_1}{2} \nabla \tilde{\Psi} \right) = \tilde{\rho}_1 - \rho_1.$$

Ce problème est résolu en utilisant des différences finies centrées d'ordre deux classiques. Avec le potentiel $\tilde{\Psi}$ ainsi obtenu on calcule un champ de vitesse $\tilde{u} = \nabla \tilde{\Psi}$, qui peut être vu comme le champ de vitesse nécessaire pour advecter $\tilde{\rho}_1$ sur ρ_1 . Comme on souhaite l'utiliser comme une correction pour transporter ρ_0 et non pas $\tilde{\rho}_1$, nous devons l'advecter en sens inverse afin de retrouver le champ de vitesse initial correspondant pour ρ_0 . Nous intégrons donc en sens inverse en time le système II.4.5-II.4.6 avec pour conditions finales $\tilde{\rho}_1$ and \tilde{u}_1 . Le champ de vitesse résultant de cette advection rétrograde est ajouté à u_0 comme terme correctif.

La résolution numérique des équations II.4.5-II.4.6 fait appel à une méthode particulière avec remaillage, similaire à celle développée dans [170] pour les équations d'Euler compressible. Ce type de méthode est particulièrement bien adapté à la résolution de ce problème. En effet, les quantités discrétisées sur les particules sont transportées tant que les particules ne se croisent pas (donc tant qu'il n'y a pas de choc) ce qui permet d'avoir des pas de temps grands, et évite d'introduire inutilement de la diffusion numérique.

II.4.2 Validations numériques

Nous avons d'abord validé les deux algorithmes sur plusieurs exemples impliquant des densités à support compact, avec des intersections entre densité initiale et finale plus ou moins grandes.

Puis nous avons réalisé un cas-test relatif à des sections d'abdomen d'un patient en train de respirer. Les images ont été fournies par Baudoin Dennis de Senneville. La figure II.10 montre le champ de vitesse initial relatif au transport optimal entre deux scans consécutifs.

Pour montrer l'avantage en terme de temps de calcul de la nouvelle méthode dans les cas favorables, nous avons comparé le temps CPU nécessaire pour résoudre le problème MKP avec les deux versions de la méthodes, comparées au

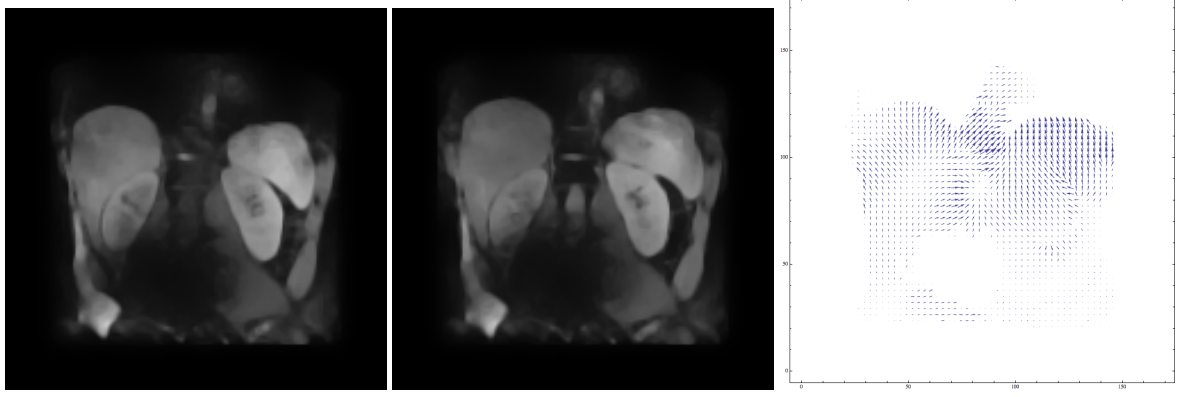


FIGURE II.10 – Gauche : Scans consécutifs de sections d’abdomen : densités initiale et finale en niveaux de gris, droite : mapping obtenu avec notre méthode.

temps avec la méthode de Benhamou et Brenier, dans le cas de deux gaussiennes pour lesquelles les densités initiale et finale sont assez proches. Comme les critères de convergence sont différents pour les deux méthodes, on mesure le temps CPU nécessaire pour que la valeur initiale du critère pris pour déterminer la convergence soit divisée par 30, 60 et 100, voir Table II.6 .

	BB méthode		Méthode eulérienne		Méthode lagrangienne	
	$crit_b^n$	temps CPU	$crit^n$	temps CPU	$crit^n$	temps CPU
Critère initial (IC)	0.707107	0m0s	2.063231	0m0s	2.063231	0m0s
$\approx IC/30$	0.023547	2m36s	0.06004	0m4.13s	0.060026	0m2.6s
$\approx IC/60$	0.011784	5m12s	0.030851	0m5.32s	0.034312	0m3.2s
$IC/60 < IC \leq IC/100$	0.009841	19m31s	0.018421	0m6.22s	0.027887	0m3.74s

TABLE II.6 – Temps CPU : méthode de Benhamou et Brenier vs. nouvelle méthode

On observe que le temps de calcul est très petit pour notre méthode comparée à celle de Benhamou et Brenier. Nous avons étudié d’autres cas où la distance de Wasserstein est plus grande. L’avantage en terme de temps de calcul de la nouvelle méthode par rapport à celle de Benhamou et Brenier est moins conséquent, mais toujours présent. La nouvelle méthode présente donc les avantages suivants : facilité d’implantation et faible temps de calcul comparatif dans le cas d’un transport entre deux densités assez proches, qui rendent cette méthode attrayante par exemple dans le cas de traitement d’images.

Cette méthode a ensuite été utilisée dans le cadre du projet européen FFAST, en collaboration avec Haysam Telib et Angelo Iollo, en combinaison avec la méthode pour des problèmes elliptiques avec des interfaces qui sera présentée dans la section III.1, pour reconstruire entre deux instants les résultats de modèles réduits appliqués à des écoulements compressibles autour d’un profil d’aile d’avion en mouvement. Puis elle a été reprise pour un usage similaire dans le cadre du code "NaSCar" développé par Michel Bergmann pour calculer des images intermédiaires et des vitesses de déformation pour la simulation de nage de poissons [18]. Cette même approche est poursuivie actuellement dans la thèse de Guillaume Ravel, co-encadrée par Afaf Bouharguane et Patrick Babin, dans le but de reproduire par des simulations numériques la nage de larves de poissons zèbres.

II.5 Level-set d’ordre élevé au cours du temps

Ce travail a été réalisé en collaboration avec Michel Bergmann et Francky Luddens, publié dans [21] et dans un proceeding de conférence [20].

La level-set, dont on a rappelé quelques propriétés dans la section I.1, décrit implicitement la géométrie de l’interface. Elle évolue au cours du temps de manière à ce que son isoligne zéro soit transportée à la vitesse physique de l’interface. La précision du calcul de ce transport de la level-set influe donc sur la précision globale de la solution numérique par plusieurs mécanismes :

- en premier lieu, car la précision de la position de l'interface en tant que telle est directement reliée à la précision des résultats,
- de plus, l'évolution d'une fonction level-set discrétisée n'est pas intrinsèquement conservative. Par exemple, dans le cas d'une level-set séparant un fluide et un solide, ou deux fluides, un léger décalage de la position de l'interface par rapport à la valeur exacte peut produire des transferts de masse et de quantité de mouvement de part et d'autre de l'interface, qui peuvent à leur tour occasionner des problèmes de stabilité numérique si les quantités définies de chaque côté de l'interface ont des valeurs très différentes,
- enfin, la normale et la courbure à l'interface, qui peuvent être utilisées dans différents buts, par exemple pour calculer la pression dans la méthode présentée dans la sous-section III.3, peuvent être évaluées avec la formule I.1.2 avec des dérivées premières ou secondes de la level-set. Pour que cette évaluation soit consistante il faut donc a priori utiliser au minimum une méthode d'ordre trois en espace et en temps. Plus précisément, idéalement, pour des calculs réussis, la fonction level-set doit également rester une fonction régulière, c'est-à-dire éviter la formation de gradient trop forts. En effet, des tests numériques, par exemple dans [21], montrent une vaste amplitude de résultats pour un même ordre de convergence entre une fonction bien régulière comme la fonction distance, et d'autres fonctions level-set avec des gradients plus importants.

Différentes alternatives sont possibles pour répondre à cette problématique. On peut choisir par exemple de calculer une level-set peu précise, c'est-à-dire dans ce contexte d'ordre un ou deux, mais formulée de manière à rester conservative ou presque conservative, par exemple avec une méthode VOF. Dans ce cas il faut reconstruire les valeurs de la normale et de la courbure sur l'interface par d'autres moyens que les formules faisant appel aux dérivées de la level-set. Une reconstruction stable et précise de ces valeurs n'est pas particulièrement aisée. Une autre possibilité est de chercher à calculer une level-set avec une précision d'ordre élevé (au moins trois), avec des gradients modérés. Dans ce cas, on peut utiliser les formules I.1.2, et on espère que le fait d'avoir cette précision d'ordre élevé limitera les problèmes de conservativité. (L'idéal serait évidemment de parvenir à concilier les deux approches : conservativité et ordre élevé, mais dans ce cas un nouvel obstacle surgit : la complexité potentielle de l'algorithme risquerait de décourager son utilisation.)

Avec Francky Luddens et Michel Bergmann, nous avons choisi l'approche consistant à résoudre la level-set avec une précision d'ordre élevé au cours du temps pour maintenir cette perte de conservativité à un niveau acceptable et permettre de calculer les quantités géométriques (normale, courbure) de manière consistante. La méthode la plus populaire actuellement pour calculer l'évolution de l'interface consiste à transporter la fonction level-set à la vitesse de l'écoulement, avec un schéma WENO5 en espace et Runge-Kutta 3 en temps, puis à ré-initialiser tous les quelques pas de temps la fonction level-set comme une fonction distance. Sans cette étape de redistanciation, les distortions que subit la fonction level-set au cours de son transport peuvent conduire à des erreurs significatives ou mêmes des instabilités dans le calcul des quantités géométriques. Or cette étape occasionne souvent une perte de précision, particulièrement visible sur le calcul de la courbure de l'interface. En effet les schémas classiquement utilisés au cours de cette étape, même d'ordre élevé, ne prennent pas bien en compte ni le sens de propagation de l'information (de l'interface vers le reste du domaine), ni la position de l'interface. De plus, l'influence de cette étape de ré-initialisation appliquée tous les quelques pas de temps sur le comportement de la solution, en modifiant l'équation équivalente au schéma numérique, n'est pas claire.

Pour répondre à ces problématiques, nous avons proposé un nouvel algorithme de ré-initialisation qui présente les caractéristiques suivantes :

- il utilise dans une bande autour de l'interface une méthode de ré-initialisation d'ordre trois proposée dans [61], décentrée et tenant compte avec une précision sous-maille de la position de l'interface,
- en dehors de cette bande autour de l'interface, il utilise une nouvelle méthode de fast-sweeping qui est d'ordre deux et converge en un nombre d'itération indépendant du pas d'espace,
- cet algorithme n'est appliqué que lorsque la level-set a subi une certaine quantité de déformations, et non pas tous les quelques pas de temps.

Ce nouvel algorithme de redistanciation permet de calculer la level-set à l'ordre trois en espace et en temps, donc de préserver la précision à l'ordre un de la courbure de l'interface.

II.5.1 Schémas de ré-initialisation d'ordre élevé

Des algorithmes de ré-initialisation de la level-set comme une fonction distance signée à l'interface ont été développés pour maintenir une fonction level-set régulière au cours du temps. Ils reposent sur la résolution de l'équation eikonale

$$|\nabla \phi| = 1,$$

soit en cherchant la solution stationnaire d'une équation d'Hamilton-Jacobi dépendant du temps, comme dans [154], soit en utilisant des méthodes apparentées au principe de la méthode de Gauss-Seidel comme les méthodes de fast marching

[144, 151] ou de fast sweeping [160]. Les méthodes de fast marching ou fast sweeping produisent en général des algorithmes plus rapides, mais au détriment relatif de la précision par rapport aux méthodes de relaxation. Dans la suite, nous ne parlerons pas des méthodes de fast marching car leur algorithme est moins favorable à une parallélisation que les deux autres classes de méthodes.

II.5.1.1 Méthode de relaxation

Les méthode de relaxation sont basées sur la résolution de l'EDP

$$\partial_\tau \varphi + \text{sign}(\varphi_0) (|\nabla \varphi| - 1) = 0, \quad (\text{II.5.1})$$

où τ est un temps fictif, jusqu'à atteindre l'état stationnaire [154]. Cette équation est analogue à une équation de transport non-linéaire avec un terme source, où l'information se propage de l'interface vers le reste du domaine. La vitesse du transport est de magnitude un. Cette méthode est donc a priori plutôt lente et coûteuse car le temps que mettent les informations à se propager depuis l'interface vers le reste du domaine est proportionnel à l'inverse de l'amplitude de la vitesse de transport de ces informations. En pratique, on utilise la condition CFL $\Delta\tau = \Delta x/2$ et un schéma Runge Kutta d'ordre trois pour l'intégration en pseudo-temps.

L'équation eikonale relaxée (II.5.1) est un cas particulier d'équation d'Hamilton-Jacobi. Des schémas numériques pour de telles équations peuvent être trouvés dans [92]. Avec ce formalisme on ré-écrit (II.5.1) sous la forme semi-discrète

$$\partial_\tau \varphi + S(\varphi_0) H_G(D_x^+ \varphi, D_x^- \varphi, D_y^+ \varphi, D_y^- \varphi) = 0,$$

où H_G est le flux de Godunov défini par

$$H_G(a, b, c, d) := \begin{cases} \sqrt{\max(a, -b, 0)^2 + \max(c, -d, 0)^2} & \text{si } \text{sign}(\varphi_0) \leq 0, \\ \sqrt{\max(-a, b, 0)^2 + \max(-c, d, 0)^2} & \text{si } \text{sign}(\varphi_0) > 0. \end{cases}$$

et $S(\varphi_0)$ est une fonction signe régularisée définie par

$$S(\varphi_0) = \frac{\varphi_0}{\sqrt{\varphi_0^2 + |\nabla \varphi_0|^2 (\Delta x)^2}}.$$

Il a été montré dans [146] par Russo et Smereka que l'utilisation d'un schéma WENO-5 standard provoque un petit déplacement de l'interface à chaque itération, et qui augmente avec le nombre d'itérations. Pour améliorer la précision de la méthode, il faut donc réduire l'amplitude de ce déplacement. Comme la majeure partie de ce déplacement est causée par le fait que le stencil traverse l'interface, alors que l'information n'est pas censée se propager au travers de cette interface, Russo et Smereka ont proposé un schéma avec une correction sous-maille qui prend en compte la position de l'interface et qui évite d'utiliser de l'information du "mauvais" côté de l'interface. Avec cette correction sous-maille, il est observé numériquement que le déplacement de l'interface stoppe après quelques itérations. Cette idée a ensuite été poursuivie dans [62] avec un schéma d'ordre trois. Les dérivées discrètes de $D_x^\pm \varphi$ et $D_y^\pm \varphi$ sont calculées avec un stencil non-uniforme à 5 points, un schéma ENO-3, détaillé dans [62], si le point est situé à côté de l'interface, et un schéma WENO-5 standard sinon.

II.5.1.2 Méthode de fast sweeping

Les méthode de fast sweeping [160, 173] résolvent l'équation eikonale

$$|\nabla \varphi| = 1 \in \Omega, \quad \varphi(x) = 0 \quad \forall x \in \Gamma,$$

sur le même principe que la méthode de Gauss-Seidel. La grille est tour à tour balayée dans quatre directions,

- (1) $i = 1, \dots, n_x, j = 1, \dots, n_y,$
- (2) $i = n_x, \dots, 1, j = 1, \dots, n_y,$
- (3) $i = n_x, \dots, 1, j = n_y, \dots, 1,$
- (4) $i = 1, \dots, n_x, j = n_y, \dots, 1,$

avec une mise à jour des valeurs de φ au cours de ce balayage, mais au lieu de suivre les caractéristiques se propageant depuis l'interface Γ , les valeurs sont mises à jour dans la direction du balayage. Dans la littérature, la méthode de fast

$\frac{1}{\Delta x}$	fs1			fs3Z			fs2		
	erreur	coc	N_{it}	erreur	coc	N_{it}	erreur	coc	N_{it}
20	1.21E-02	-	3	3.85E-04	-	17	1.56E-03	-	7
40	6.29E-03	0.91	3	5.25E-05	2.77	28	5.44E-04	1.47	7
80	3.18E-03	0.97	3	7.41E-06	2.77	27	1.58E-04	1.75	8
160	1.59E-03	0.99	3	1.04E-06	2.81	33	4.27E-05	1.87	8
320	8.02E-04	0.99	3	1.44E-07	2.83	43	1.11E-05	1.94	7
640	4.01E-04	1.00	3	1.99E-08	2.85	63	2.82E-06	1.97	7

TABLE II.7 – Comparaison de trois méthodes de fast sweeping. L'erreur est $\|\varphi - d\|_{L^1(\Omega)}$. "coc" signifie "computed order of convergence", N_{it} est le nombre total d'itérations, une itération de fast sweeping correspond à un balayage dans chaque direction.

sweeping standard d'ordre un, notée ici fs1, est construite sur le principe suivant : pour calculer la nouvelle valeur de $\varphi_{i,j}$ on gèle toutes les valeurs de φ et on calcule $\varphi_{i,j}^{new}$ tel que

$$\left[\left(s \left(\frac{\varphi_{i,j}^{new} - \varphi_{\min}^x}{\Delta x} \right) \right)^+ \right]^2 + \left[\left(s \left(\frac{\varphi_{i,j}^{new} - \varphi_{\min}^y}{\Delta x} \right) \right)^+ \right]^2 = 1, \quad (\text{II.5.2})$$

où $s = \text{sign}(\varphi_{i,j})$, $(x)^+ := \max(x, 0)$ et φ_{\min}^x est défini par

$$\varphi_{\min}^x := s \min(s\varphi_{i-1,j}, s\varphi_{i+1,j}).$$

et φ_{\min}^y de manière semblable. Cette méthode requiert un nombre d'itérations indépendant de la taille de la grille pour converger, voir [174]. Une variante d'ordre plus élevé notée ici fs3Z a été développée dans [173], mais le nombre d'itérations nécessaire pour qu'elle converge augmente avec la taille de la grille.

Nous avons développé une nouvelle méthode d'ordre deux, notée fs2, pour laquelle le nombre d'itérations pour converger est stable en fonction du pas d'espace. A la place de la formule (II.5.2) on résoud

$$\left[\left(s \left(\frac{\varphi_{i,j}^{new} - \varphi_{\min}^x}{\alpha \Delta x} \right) \right)^+ \right]^2 + \left[\left(s \left(\frac{\varphi_{i,j}^{new} - \varphi_{\min}^y}{\alpha \Delta x} \right) \right)^+ \right]^2 = 1, \quad (\text{II.5.3})$$

avec $\alpha = \frac{2}{3}$ et

$$\varphi_{\min}^x := \begin{cases} \frac{4}{3}\varphi_{i-1,j} - \frac{1}{3}\varphi_{i-2,j} & \text{si } s\varphi_{i-1,j} \leq s\varphi_{i+1,j} \\ \frac{4}{3}\varphi_{i+1,j} - \frac{1}{3}\varphi_{i+2,j} & \text{sinon} \end{cases} \quad \varphi_{\min}^y := \begin{cases} \frac{4}{3}\varphi_{i,j-1} - \frac{1}{3}\varphi_{i,j-2} & \text{si } s\varphi_{i,j-1} \leq s\varphi_{i,j+1} \\ \frac{4}{3}\varphi_{i,j+1} - \frac{1}{3}\varphi_{i,j+2} & \text{sinon} \end{cases}.$$

Cette nouvelle méthode est d'ordre deux car elle consiste à résoudre

$$\max(sD_x^- \varphi_{i,j}; -sD_x^+ \varphi_{i,j}; 0)^2 + \max(sD_y^- \varphi_{i,j}; -sD_y^+ \varphi_{i,j}; 0)^2 = 1,$$

avec $D_x^\pm \varphi_{i,j}$ et $D_y^\pm \varphi_{i,j}$ définis avec une formule de différences finies d'ordre deux décentrée :

$$\begin{aligned} D_x^- \varphi_{i,j} &= \frac{3\varphi_{i,j} - 4\varphi_{i-1,j} + \varphi_{i-2,j}}{2\Delta x}, & D_y^- \varphi_{i,j} &= \frac{3\varphi_{i,j} - 4\varphi_{i,j-1} + \varphi_{i,j-2}}{2\Delta y}, \\ D_x^+ \varphi_{i,j} &= \frac{-3\varphi_{i,j} + 4\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i+2,j}}{2\Delta x}, & D_y^+ \varphi_{i,j} &= \frac{-3\varphi_{i,j} + 4\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j+2}}{2\Delta y}. \end{aligned}$$

On compare les résultats obtenus avec les méthodes fs1, fs3Z et fs2 sur l'exemple suivant : Ω est le carré $[-1; 1]$, et Γ le cercle de centre $(0,0)$ et de rayon 0.5. On initialise l'algorithme de fast sweeping en imposant la fonction distance dans une bande mince autour de l'interface. On calcule l'erreur L^1 sur φ dans le domaine entier et les résultats sont présentés dans le tableau II.5.1.2. La nouvelle méthode de fast-sweeping produit un ordre deux global, et le nombre d'itérations est petit et indépendant de la taille de la grille, comparé à la méthode d'ordre élevé de [173].

En pratique, on commence par utiliser la méthode de relaxation pour ré-initialiser les valeurs de la level-set avec une précision d'ordre trois dans une bande étroite, typiquement de largeur $5\Delta x$, autour de l'interface. Puis on utilise le fast-sweeping d'ordre deux dans le reste du domaine. La méthode de relaxation et la méthode de fast-sweeping étant facilement parallélisables [58], l'algorithme global l'est aussi.

$\frac{1}{h}$	case 1		case 2		case 3		case 4	
	err.	coc	err.	coc	err.	coc	err.	coc
40	1.82E-01	-	1.18E-01	-	1.47E-01	-	1.22E-01	-
80	5.53E-02	1.69	6.35E-02	0.87	4.63E-02	1.64	4.16E-02	1.53
160	7.07E-02	-0.35	7.62E-02	-0.26	1.51E-02	1.61	1.30E-02	1.66
320	6.56E-02	0.11	9.56E-02	-0.33	4.58E-03	1.71	3.87E-03	1.74
640	1.10E-01	-0.75	2.01E-01	-1.07	3.27E-04	3.80	3.05E-04	3.66

TABLE II.8 – Cas-test du vortex : erreur L^∞ sur la courbure à $t = 2$.

II.5.1.3 Couplage entre transport et ré-initialisation

Pour calculer le transport de la level-set, on utilise un schéma WENO-5 pour les dérivées spatiales et un schéma RK3-TVD pour l'intégration en temps. Il est nécessaire d'effectuer de temps en temps une ré-initialisation de la level-set pour éviter la création de gradients trop petits ou trop forts près de l'interface. L'usage courant est donc de pratiquer une ré-initialisation tous les quelques pas de temps, mais, au moins dans le cas d'une méthode de relaxation, de n'en faire que quelques itérations afin de limiter l'influence de cette étape de calcul. Par contre, notre stratégie est d'effectuer un nombre limité d'étapes de ré-initialisation, uniquement quand la fonction level-set dévie trop fortement de la fonction distance.

On rappelle que la fonction distance vérifie la propriété $|\nabla d| = 1$. On définit la quantité $r_g(\nabla \varphi) := |||\nabla \varphi| - 1|||_{L^1(\Omega)}$, on choisit un seuil $\delta > 0$, et on applique la stratégie suivante

1. *Initialisation* : $\varphi_0 = d_0$, la fonction distance signée à Γ_0 ,
2. *Transport* : tant que $r_g(\nabla \varphi) < \delta$, on calcule l'évolution de φ ,
3. *Ré-initialisation* : quand $r_g(\nabla \varphi) \geq \delta$, on pose $\varphi_0 = \varphi$ et on re-calcule la distance signée d à l'interface. On pose $\varphi = d$ et on retourne à *Transport*

Avec cette stratégie, le nombre de ré-initialisations est à-peu-près constant au cours d'une simulation, indépendamment du pas d'espace choisi.

II.5.2 Validations numériques

II.5.2.1 Cas-test du vortex

On commence par montrer que notre méthode préserve la convergence à l'ordre un du calcul de la courbure à l'interface κ , ce qui n'est pas le cas pour les algorithmes classiques de calcul de la level-set. On étudie la déformation d'une interface initialement circulaire placée dans un vortex [12] en imposant un champ de vitesse défini par le potentiel

$$U = \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \nabla^\perp \omega, \quad \omega = \frac{1}{2\pi} \sin^2(\pi x) \sin^2(\pi y). \quad (\text{II.5.4})$$

L'interface s'étire et s'enroule en spirale autour du centre du domaine. Comparé à [12], nous imposons une vitesse périodique en temps afin de dénouer la spirale et de revenir à la configuration initiale, ce qui nous permet de calculer l'ordre de la convergence des méthodes que nous comparons. On compare les résultats obtenus avec quatre stratégies différentes :

1. 5 itérations de la méthode de relaxation, tous les 5 pas de temps,
2. 3 itérations de la méthode de relaxation, tous les pas de temps,
3. la nouvelle méthode avec $\delta = 0.1$,
4. la nouvelle méthode avec $\delta = 0.01$.

Les résultats de convergence pour la courbure sont présentés dans le tableau II.8. On constate que pour ce test les stratégies habituelles de ré-initialisation ne permettent pas d'obtenir des valeurs précises de κ , alors qu'avec la nouvelle méthode on observe une convergence à l'ordre un. On observe aussi sur ce test que le nombre d'étapes de ré-initialisation est presque uniforme en h , et que l'erreur sur la position de l'interface et la perte de volume sont significativement améliorées avec la nouvelle stratégie (voir [21] pour les détails des études de convergence).

II.5.2.2 Formation de gradients raides près de l'interface

On illustre ici la nécessité de réaliser l'étape de ré-initialisation quand des gradients forts sont susceptibles d'apparaître. En effet, la ré-initialisation peut jouer un rôle critique pour calculer correctement la courbure quand l'écoulement a

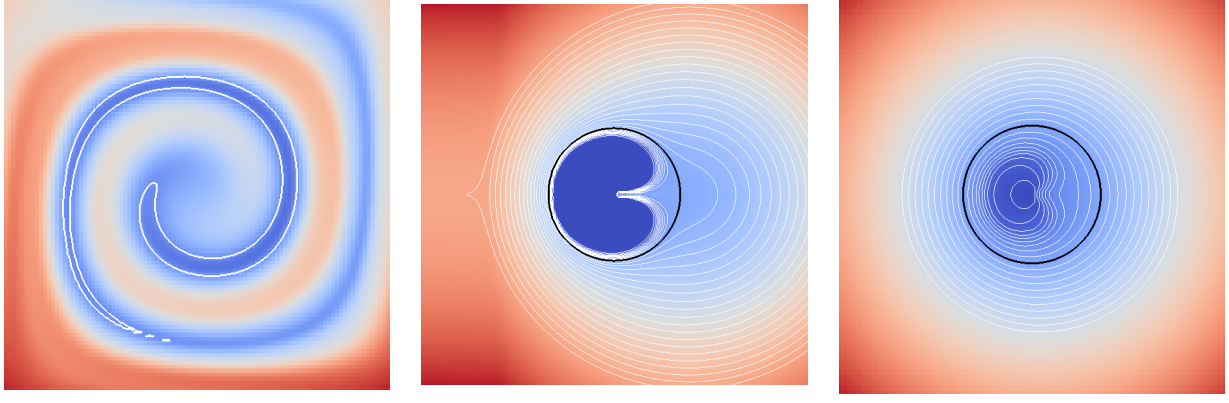


FIGURE II.11 – Gauche : Level-set au temps final du cas-test du vortex, milieu : isocontours de φ pour le test du cylindre à $t = 6$ sans ré-initialisation, droite : idem mais avec réinitialisation régulière. Γ est la ligne noire épaisse.

$\frac{1}{h}$	$\delta = 0.01$		$\delta = 0.1$		No reinit.	
	err.	coc	err.	coc	err.	coc
40	7.24E-02	-	8.35E-02	-	1.40E+00	-
80	3.91E-02	0.87	1.68E-02	2.27	2.15E+00	-0.61
160	9.71E-03	1.99	5.09E-03	1.71	3.53E+00	-0.71
320	3.66E-03	1.40	2.51E-03	1.01	8.22E+01	-4.52
640	2.51E-03	0.54	1.88E-03	0.42	1.57E+02	-0.93

TABLE II.9 – Test du cylindre : $\|\kappa_h - \kappa\|_{L^\infty(\Gamma)}$ à $t = 6$ et ordre de convergence numérique.

tendance à faire apparaître de forts gradients de la level-set, par exemple dans le cas de changements topologiques, comme la fusion de deux bulles [154]. Nous avons mis en évidence ce comportement sur deux tests, l'un d'eux étant présenté ici, l'autre menant à la même conclusion.

On cherche dans ce test à reproduire un écoulement autour d'un cylindre fixe. Les composantes de la vitesse à l'extérieur du cylindre sont données en coordonnées polaires par

$$V_r = \left(1 - \frac{1}{r^2}\right) \cos(\theta), \quad (\text{II.5.5})$$

$$V_\theta = -\left(1 + \frac{1}{r^2}\right) \sin(\theta). \quad (\text{II.5.6})$$

L'interface initiale Γ_0 est le cercle de rayon 1, centré à l'origine, et le domaine de calcul est $\Omega = [-3; 3]^2$. Pour obtenir à l'intérieur du cylindre un champ de vitesse sans singularité à l'origine, on pose

$$U_r = \alpha c(r) V_r,$$

$$U_\theta = \alpha c(r) V_\theta,$$

avec $c(r) = \min(1, \frac{r}{0.5})^3$ et α choisi de manière à avoir $\|U\|_{L^\infty(\Omega)} = 1$. Ainsi, l'interface ne bouge pas bien que U soit non-nulle sur l'interface. On réalise les calculs dans trois cas : $\delta = 0.01$, $\delta = 0.1$, et aucune ré-initialisation avant le temps final. Puis on calcule la courbure au temps final. Sans ré-initialisation, les isocontours de φ sont très fortement distordus, voir Figure II.11. Les résultats pour l'erreur sur la courbure de l'interface en norme L^∞ sont présentés Table II.9 et montrent que la ré-initialisation est nécessaire pour obtenir un calcul consistant de κ .

Nous avons également vérifié dans [122] que le choix du seuil δ ou du pas de temps Δt a une influence faible sur la convergence. Cette nouvelle méthode de calcul de la level-set sera appliquée dans la section III.3 au cas d'un écoulement bifluide. Les résultats obtenus avec une réinitialisation classique et la nouvelle méthode seront comparés.

II.6 Modélisation et simulation de suspensions de particules

Ce travail a été réalisé dans le cadre de la thèse de Baptiste Lambert, co-encadrée avec Michel Bergmann et publié dans [103]. Les développements informatiques ont été réalisés dans le code "NaSCar" dont Michel Bergmann est l'instigateur principal.

L'étude d'écoulements de particules a de nombreux intérêts pour des applications industrielles et de recherche, telles que la fabrication de béton, le transport de boues ou de sédiments, le traitement des eaux usées, ou la fabrication de certains plastiques. La simulation numérique d'écoulement de particules dans un fluide visqueux apporte des informations importantes pour la compréhension des phénomènes physiques en jeu ou pour l'optimisation de procédés industriels.

Les méthodes les plus avancées actuellement couplent un solveur fluide résolvant les équations de Navier-Stokes avec un solveur des équations de Newton-Euler résolvant les mouvements des particules. Bien que ces méthodes permettent de résoudre finement l'écoulement, elles ne sont pas capables de résoudre intégralement les interactions hydrodynamiques entre des particules pratiquement en contact, et cela indépendamment de la nature du maillage choisi, qu'il soit adapté ou non aux interfaces fluides-particules. En effet, quand une particule de rayon a est sur le point d'entrer en collision avec un obstacle, la présence de l'obstacle est perçue par la particule via la modification des forces hydrodynamiques exercées par le solvant. L'apparition d'interactions hydrodynamiques de courte distance, communément appelées forces de lubrification, est la conséquence du drainage du fluide dans la zone interstitielle entre la particule et l'obstacle. La composante normale et tangentielle des forces de lubrification évoluent comme ε^{-1} et $\log(\varepsilon)$ respectivement, avec $a\varepsilon$ la distance de séparation entre la particule et l'obstacle. La résolution numérique de ces singularités n'est possible que pour certains écoulements de Stokes, et a un coût de calcul important. Dans le cas général, les forces de lubrification ne sont résolues que partiellement. C'est pour cela que des modèles de lubrification, utilisant des solutions analytiques provenant de la théorie de la lubrification, sont ajoutés aux méthodes numériques.

L'immense majorité des modèles de lubrification existants sont limités à des particules sphériques et/ou à des écoulements en régime de Stokes. Les interactions entre particules avec des formes plus complexes sont traitées par des modèles empiriques, bien que les suspensions de particules parfaitement sphériques et monodisperses soient en pratique très rares. Nous avons développé un modèle de lubrification pour des écoulements de particules rigides convexes (et pas nécessairement sphériques) immergées dans un fluide régi par les équations de Navier-Stokes.

II.6.1 Modèle et résolution numérique dans le fluide

L'écoulement est modélisé par les équations de Navier Stokes incompressible pour un fluide newtonien de viscosité μ et de densité ρ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial (u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\mu}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \\ \quad \quad \quad + \chi \lambda (u_{\tau,i} - u_i), \\ \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \end{array} \right. \quad (\text{II.6.1})$$

avec $(i, j) = \{1, 2, 3\}^2$, u_i étant les composantes de la vitesse, et p la pression. Ce système d'équations est résolu sur un maillage cartésien uniforme couvrant la totalité du domaine d'intérêt. Les cellules solides de maillage (à l'intérieur des particules) sont repérées à l'aide d'une indicatrice χ qui renvoie le signe de la level-set globale. Les équations de Navier-Stokes sont discrétisées en espace en utilisant un arrangement colocalisé au centre des mailles des variables primitives (p, u_i) . L'intégration en temps se fait à partir du schéma de projection classique de Chorin [39] et Temam [157].

A l'interface fluide-particule, on considère une condition de non-glissement qui est implicitement imposée par le terme de pénalisation $\chi \lambda (u_{\tau,i} - u_i)$, avec le coefficient de pénalisation λ choisi arbitrairement grand [6]. Les vitesses pénalisées aux cellules solides à l'interface fluide-particule sont corrigées par la méthode IPC (Image Point Correction) [19] ce qui permet d'obtenir une pénalisation globale de second ordre en espace.

La dynamique des particules est calculée à partir des équations de Newton-Euler appliquées au centre de masse des particules :

$$\left\{ \begin{array}{l} m_i \frac{d\mathbf{U}_i}{dt} = \mathbf{F}_i, \\ \frac{dJ_i \boldsymbol{\Omega}_i}{dt} = \mathbf{T}_i, \end{array} \right. \quad (\text{II.6.2})$$

avec m_i la masse, J_i la matrice d'inertie, \mathbf{U}_i et $\boldsymbol{\Omega}_i$ les vitesses de translation et de rotation de la particule P_i . La force \mathbf{F}_i et le couple \mathbf{T}_i résultent des collisions, des effets hydrodynamiques et de la gravité appliqués à la particule P_i .

Les forces et couples hydrodynamiques sont décomposés en :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{F}_i^{\text{hyd}} = \mathbf{F}_i^{\text{solv}} + \mathbf{F}_i^{\text{deg}}, \\ \mathbf{T}_i^{\text{hyd}} = \mathbf{T}_i^{\text{solv}} + \mathbf{T}_i^{\text{deg}}. \end{array} \right. \quad (\text{II.6.3})$$

avec $\mathbf{F}_i^{\text{solv}}$ et $\mathbf{T}_i^{\text{solv}}$ les contributions entièrement résolues par le solveur, et $\mathbf{F}_i^{\text{deg}}$ et $\mathbf{T}_i^{\text{deg}}$ les contributions non résolues par le solveur. Les contributions résolues sont obtenues par l'intégration de la contrainte du fluide sur la surface de la particule. Les autres sont la conséquence des erreurs commises par la discrétisation du problème en espace et en temps, et notamment, la sous-résolution qui en résulte dans la zone interstitielle. L'objectif d'un modèle de lubrification est d'estimer $\mathbf{F}_i^{\text{deg}}$ et $\mathbf{T}_i^{\text{deg}}$ afin de minimiser l'influence des approximations numériques sur les forces et couples hydrodynamiques totaux. Ce modèle est décrit dans la sous-section suivante.

Dans un écoulement de Stokes, le contact entre deux particules parfaitement sphériques est théoriquement impossible à cause de la singularité de la force de lubrification. Cependant pour simuler des écoulements plus réalistes, un modèle de collision doit être utilisé pour des raisons à la fois physiques et numériques. D'un point de vue physique, les forces de lubrification seules ne peuvent expliquer le rebond de particules qui adviennent pour des nombres de Stokes supérieurs à un certain seuil [91]. De plus, les surfaces réelles ne sont jamais parfaitement lisses et un contact peut apparaître à l'échelle de la rugosité de la particule. D'un point de vue numérique, il est commode d'imposer une distance minimale pour le calcul des forces de lubrification, afin que la force de lubrification ne prenne pas des valeurs trop fortes quand la particule se rapproche de plus en plus de l'obstacle. En effet cela aurait comme conséquence d'utiliser des pas de temps de plus en plus petits et menacerait la stabilité de la méthode.

La force et le couple générés par la collision de la particule avec un obstacle sont modélisés ici avec le modèle de sphères molles de Costa *et al.* [135] qui est un des modèles les plus aboutis : la mesure du recouvrement qui arrive pendant un pas de temps entre la particule et l'obstacle (particule ou mur) est utilisée comme paramètre pour calculer les forces normales et tangentielles de contact, selon une modélisation empirique ayant pour paramètres les propriétés du matériau.

II.6.2 Le modèle de correction local des forces de lubrification

Notre modèle de correction des forces et couples de lubrification est fondé sur les mêmes hypothèses de base que la théorie de lubrification pour des particules sphériques. On considère deux particules isolées dans un espace infini. Le fluide est considéré au repos, ainsi qu'une des particules, alors que la seconde est animée d'un mouvement constant de translation en direction de la particule au repos. Ce mouvement entraîne la compression du fluide entre les deux particules ce qui est à l'origine de la composante principale de la force de lubrification. Si on suppose que la distance entre les deux particules est très petite, le mouvement du fluide dans la zone interstitielle peut être approché par les équations de Stokes. Ainsi il est possible, avec un peu de calcul, d'exprimer la force et le couple hydrodynamiques agissant dans cette zone interstitielle. On peut traiter de même le cas de la translation d'une particule à proximité d'une seconde particule initialement au repos. Ce mouvement entraîne le cisaillement du fluide interstitiel ce qui génère une force et un couple hydrodynamiques sur les deux particules. On obtient donc ainsi les expressions des forces et couples de lubrification pour un écoulement en régime de Stokes.

Notre modèle utilise l'ordre dominant des forces et couples théoriques comme correction des forces et couples hydrodynamiques :

$$\begin{cases} \mathbf{F}_i^{\text{hyd}} &= \mathbf{F}_i^{\text{solv}} + \sum_{j \in [1, N] \setminus \{i\}} \mathbf{F}_{i,j}^{\text{lub}} + \mathbf{F}_{i,\text{wall}}^{\text{lub}}, \\ \mathbf{T}_i^{\text{hyd}} &= \mathbf{T}_i^{\text{solv}} + \sum_{j \in [1, N] \setminus \{i\}} \mathbf{T}_{i,j}^{\text{lub}} + \mathbf{T}_{i,\text{wall}}^{\text{lub}}, \end{cases} \quad (\text{II.6.4})$$

avec $\mathbf{F}_{i,j}^{\text{lub}}$ et $\mathbf{T}_{i,j}^{\text{lub}}$ l'ordre dominant des force et couple de lubrification entre les particules P_i et P_j définis par la théorie de lubrification. Ces corrections sont faites localement sur la surface d'une particule, lorsque la zone considérée de la particule devient trop proche d'une autre particule ou d'un mur, et qu'on ne peut donc plus calculer correctement les effets hydrodynamiques, voir Figure II.12. La validité de la correction ainsi effectuée dépend donc uniquement de la courbure locale de la particule et des caractéristiques locales de l'écoulement, sans le besoin d'aucune tabulation. Ces corrections peuvent être appliquées directement pour des particules sphériques. Dans le cas de particules convexes, les corrections sont calculées à partir de sphères virtuelles. Pour chaque couple de particules en interaction, deux sphères sont construites de manière à ce que leurs surfaces approchent au mieux les surfaces des particules au voisinage du point de contact. Par contre, les corrections sont faites en modélisant uniquement les interactions entre deux particules, et les interactions entre un plus grand nombre de particules ("many bodies interactions") ne sont donc pas prises en compte directement.

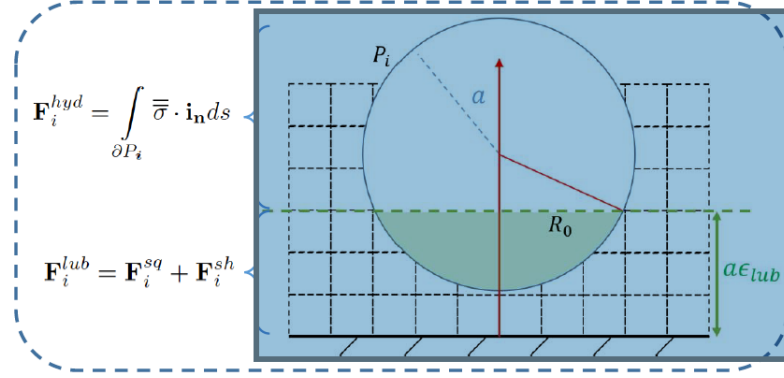


FIGURE II.12 – Calcul des forces et torques hydrodynamiques : la correction s’applique localement, pour les points de la particule à une distance de l’obstacle inférieure à $a\epsilon_{lub}$. \mathbf{F}_i^{sh} et \mathbf{F}_i^{sq} sont les composantes obtenues par la théorie de la lubrification dans les cas d’un mouvement en direction de la paroi ou d’un mouvement parallèle à la paroi.

II.6.3 Validations du modèle local de lubrification pour des particules sphériques

Notre modèle de lubrification (LLCM) a été validé dans un premier temps dans le cas de particules sphériques pour lesquelles il existe une large bibliographie de mesures expérimentales.

La suspension d’une particule au-dessus d’un mur a été simulée avec succès, en comparaison aux mesures expérimentales de Harada *et al.*[80]. La Figure II.13 compare la vitesse U de la particule obtenue avec notre modèle de lubrification local et le modèle de lubrification de la littérature tabulé CLM [135] à des résultats expérimentaux de Harada *et al.*[80]. Les simulations numériques ont été réalisées sur une grille cartésienne uniforme avec un pas d’espace $h = 1/40$ et $N_p = 3200$ éléments pour le maillage sur la surface de la particule. Les corrections locales de lubrification sont réalisées pour les éléments du maillage de la particule qui sont à une distance inférieure à $2\Delta y$ du mur.

La comparaison avec le modèle CLM montre que le LLCM est aussi précis que les modèles de lubrification conçus spécialement pour des sphères. Il est en revanche dans ce cas (une unique particule impactant verticalement, un mur) légèrement plus coûteux (10%). En revanche, il n’est pas limité à des particules sphériques et ne nécessite pas la tabulation de paramètres. Une étude générale de la convergence des simulations effectuées et de la stabilité des résultats par rapport aux paramètres tels que la distance d’activation du modèle a été réalisée et atteste de la robustesse de nos résultats.

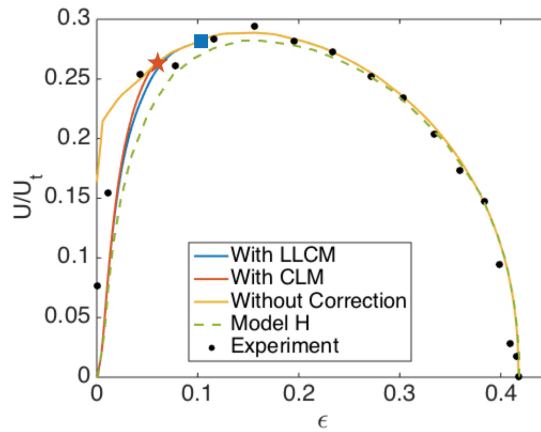


FIGURE II.13 – Evolution de la vitesse verticale de la particule en fonction de la distance adimensionnée au mur. Les simulations avec le modèle local LLCM et le modèle tabulé (CLM) sont comparées aux résultats expérimentaux de Harada [80] et au modèle. Les modèles LLCM et CLM sont activés pour ϵ plus petit que le carré bleu et l’étoile rouge respectivement.

Une gamme étendue de nombres de Stokes a ensuite été traitée pour valider le LLCM couplé avec le modèle de collision de sphères molles de [135]. Les rebonds de particules sont reproduits avec précision quand la particule impacte

le mur avec des angles normaux [70] ou inclinés [94], ainsi que dans le cas de l'interaction entre deux particules dans un écoulement cisaillé. Enfin, nous avons validé le cas de rebonds multiples : les Figures II.14 et II.15 comparent l'évolution de la vitesse verticale et de la position simulées de la particule aux mesures de Gondret *et al.* [136] pour des collisions sèches ou mouillées. Les simulations ont été réalisées avec $h = 1/30$.

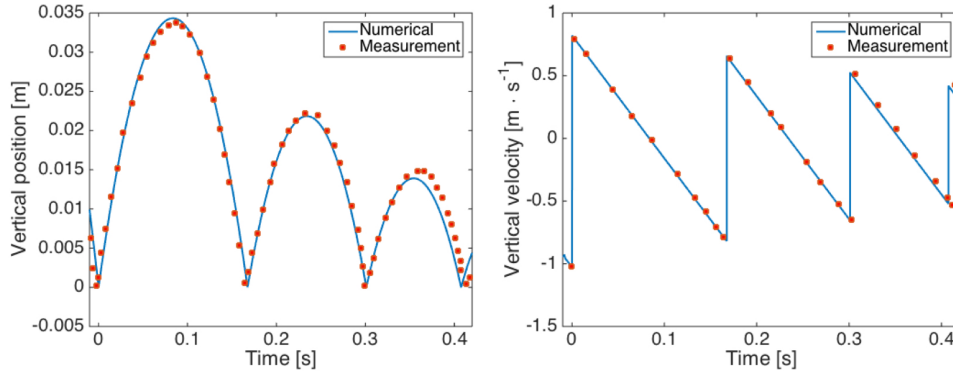


FIGURE II.14 – Vitesse verticale et position de la particule immergée dans de l'air qui impacte un mur. Les résultats expérimentaux sont issus de Gondret *et al.* [136]

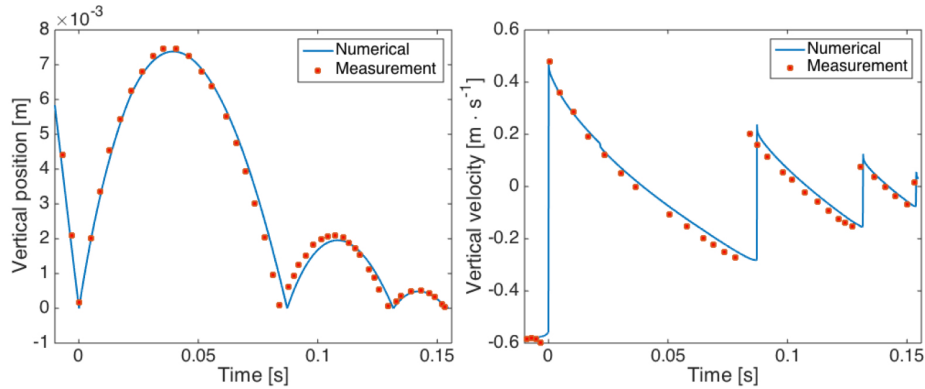


FIGURE II.15 – Vitesse verticale et position de la particule immergée dans de l'huile de silicone (RV10) qui impacte un mur. Les résultats expérimentaux sont issus de Gondret *et al.* [136]

II.6.4 Etude du modèle local de lubrification pour des particules ellipsoïdales

L'étude expérimentale de particules non-sphériques en interaction est un sujet qui a été jusqu'à présent à peine traité dans la littérature, car elle est plus complexe à réaliser que pour des particules sphériques. Pour évaluer la pertinence de notre modèle local dans le cas de particules non-sphériques, et faute de données disponibles dans la littérature, nous avons réalisé une expérience préliminaire, en collaboration avec Wim-Paul Breugem et Christian Poelma (TU-Delft) pour étudier la trajectoire d'un ellipsoïde qui impacte un mur.

Les mesures ont été faites en deux phases. Dans la première phase, le mouvement de la particule a été enregistré dans un plan vertical avec une seule caméra, voir Figure II.16. Puis dans un deuxième temps le dispositif a été amélioré en utilisant des miroirs afin de tenir compte du déplacement de la particule dans la troisième dimension, qui bien que d'amplitude faible a une influence sur la trajectoire totale. Une comparaison des simulations numériques aux résultats de cette expérience préliminaire est en cours. Idéalement, une validation complète serait effectuée en comparant les simulations à des expériences où la position et l'orientation de la particule dans les trois dimensions pourrait être mesurée. Ce manque de données expérimentales constitue actuellement un obstacle à la validation des modèles de lubrification existants dans le cas de particules non-sphériques. Une autre possibilité que nous investigons aussi est d'utiliser pour références des résultats de simulations DNS très précises.

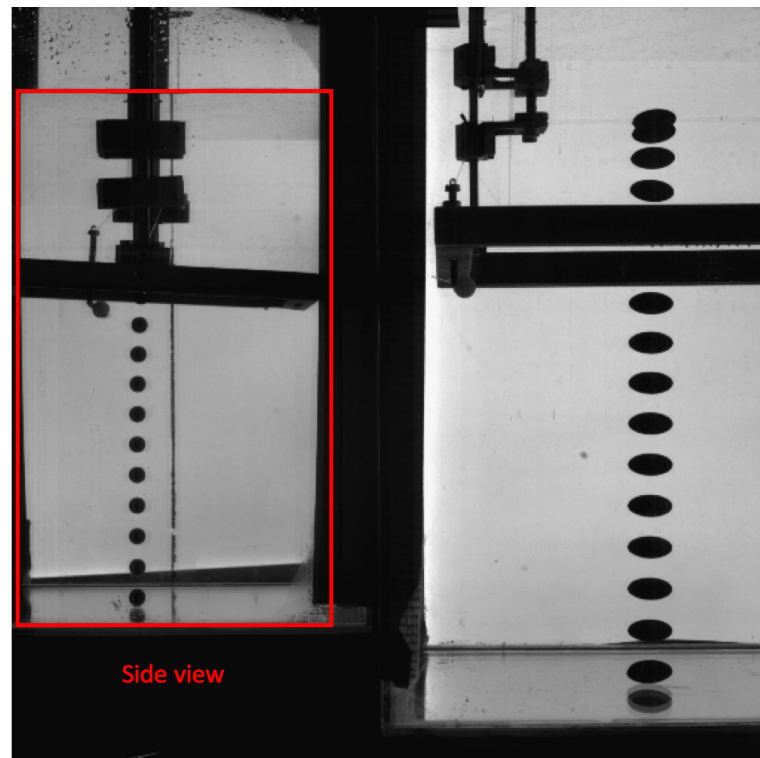


FIGURE II.16 – Expérience au TU Delft : trajectoire d’une particule ellipsoïdale dans de la glycérine (50%). Les images à des intervalles constants de 0.2s sont superposées.

Chapitre III

Problèmes elliptiques avec géométries complexes

III.1 Résolution de problèmes elliptiques avec des interfaces immergées

Ce travail a été effectué avec Marco Cisternino, à l'époque étudiant en thèse sous la direction d'Angelo Iollo, en co-tutelle entre l'Université de Bordeaux et le Politecnico di Torino, et publié dans [42]. Nous avons développé une méthode sur grille cartésienne pour résoudre le problème suivant :

$$\nabla \cdot (k \nabla u) = f \text{ on } \Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \quad (\text{III.1.1})$$

$$[[u]] = \alpha \text{ on } \Sigma \quad (\text{III.1.2})$$

$$[[k \frac{\partial u}{\partial n}]] = \beta \text{ on } \Sigma \quad (\text{III.1.3})$$

avec des conditions aux limites à préciser sur $\delta\Omega$, et où $[[\cdot]]$ signifie $\cdot_1 - \cdot_2$. Comme illustré Figure III.1, Ω est composé de l'union de deux sous-domaines Ω_1 et Ω_2 , séparés par une interface de forme complexe Σ . Ce problème elliptique avec des discontinuités au travers de l'interface apparaît dans de nombreux modèles issus de la physique ou de la biologie, parmi lesquels on peut citer le transfert de chaleur, l'électrostatique, la dynamique des fluides, mais également la modélisation de croissance tumorale [35], ou la modélisation du potentiel électrique dans une cellule biologique [36], comme cela sera abordé dans une prochaine section.

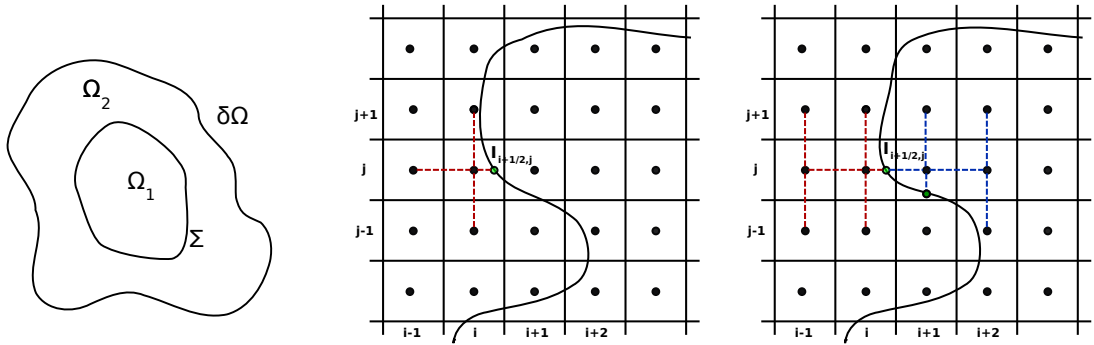


FIGURE III.1 – Gauche : exemple de domaine avec une interface complexe, milieu : discrétisation de l'opérateur elliptique sur un point de grille irrégulier, droite : discrétisation des flux au travers de l'interface.

La méthode est basée sur une discrétisation par différences finies et une approche dimension par dimension. Pour résoudre le problème (III.1.1)-(III.1.3) près de l'interface, on introduit des inconnues supplémentaires sur les intersections de l'interface Σ avec la grille, voir Figure III.1). Ces inconnues d'interface sont utilisées pour la discrétisation de l'opérateur elliptique sur les points de grille dits irréguliers, et permettent de découpler cette discrétisation entre les différents sous-domaines. Ils évitent d'utiliser sur ces points des formules spécifiques faisant intervenir des termes correctifs

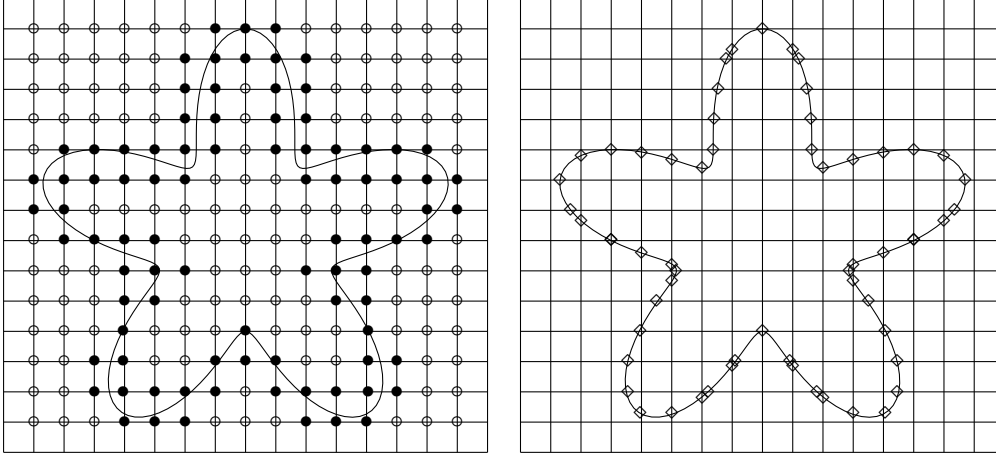


FIGURE III.2 – Gauche : les points de grille réguliers sont indiqués par des cercles \circ , les irréguliers (appartenant à Ω_h^*) par des bullets \bullet , droite : points d’interfaces (Σ_h).

dépendant des conditions de saut et de la géométrie locale, qui peuvent être complexes, comme dans le cas de nombreuses méthodes sur grille cartésienne pour ce type de problème. Pour résoudre ces inconnues d’interface, on discrétise les conditions de saut au travers de l’interface, avec une précision d’ordre deux. L’erreur de troncature est d’ordre un pour la discrétisation de l’opérateur elliptique près de l’interface, et d’ordre deux pour celle des conditions de saut. Les points concernés étant situés autour de l’interface, qui est de dimension inférieure à celle du domaine de calcul, l’influence de cette erreur de troncature reste suffisamment faible pour maintenir une convergence à l’ordre deux du schéma en norme L^∞ .

La plupart des méthodes cartésiennes d’ordre deux présentes dans la littérature utilise des procédures itératives : [115] and [25], ou des dérivées d’ordre plus élevé : [171], ou encore des changement locaux de coordonnées près de l’interface : [110] and [115], ou nécessitent de résoudre localement des systèmes linéaires : [110], [116]. En comparaison, notre méthode est rapide à formuler, car nous utilisons une discrétisation explicite des conditions de saut au lieu de chercher à l’incorporer dans la discrétisation de l’opérateur elliptique. Ce découplage entre la discrétisation de l’opérateur elliptique et celle des conditions de saut au travers de l’interface permet de modifier facilement l’une ou l’autre et de les adapter à un problème différent comme on verra dans la section suivante.

Le fait d’avoir des variables sur l’interface peut être vu comme un inconvénient, parce que la structure de la matrice est changée par rapport à un opérateur discret de type Laplacien classique. Mais d’un autre côté, dans le cas de problèmes où il est utile de définir des quantités sur l’interface (telle que la pression, dans le cas d’écoulements bifluïdes, ou bien le potentiel électrique sur la membrane d’une cellule biologique, considéré dans des problèmes d’électroporation), le fait d’avoir des inconnues sur l’interface simplifie les choses.

III.1.1 Description de la méthode

On note u_{ij}^h l’approximation de u sur le point (x_i, y_j) . L’ensemble des points de grille situés dans le domaine Ω est noté Ω_h . L’ensemble des points de grille irréguliers est noté Ω_h^* . On définit le point d’interface $I_{i+1/2,j} = (x_{i+1/2}, y_j)$ comme l’intersection de l’interface et du segment $[M_{ij}M_{i+1,j}]$, si elle existe. De même, le point d’interface $I_{i,j+1/2} = (x_i, y_{j+1/2})$ est défini comme l’intersection de l’interface avec le segment $[M_{ij}M_{i,j+1}]$. Les inconnues d’interface sur les points $I_{i+1/2,j}$ ou $I_{i,j+1/2}$ sont par convention les valeurs de la solution numérique de chaque côté de l’interface. On les note $u_{i+1/2,j}^{1,h}$ et $u_{i+1/2,j}^{2,h}$, ou bien $u_{i,j+1/2}^{1,h}$ et $u_{i,j+1/2}^{2,h}$. L’ensemble des points d’interface est noté Σ_h , voir Figure III.14.

III.1.1.1 Opérateur elliptique discret

On utilise un stencil à cinq points, voir Figure III.1. Sur les points réguliers, il s'agit du schéma centré d'ordre deux classique :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (k \nabla u)(x_i, y_j) &\approx \frac{k_{i+1/2,j}(u_{i+1,j} - u_{i,j}) - k_{i-1/2,j}(u_{i,j} - u_{i-1,j})}{dx^2} \\ &+ \frac{k_{i,j+1/2}(u_{i,j+1} - u_{i,j}) - k_{i,j-1/2}(u_{i,j} - u_{i,j-1})}{dy^2} \end{aligned} \quad (\text{III.1.4})$$

avec $k_{i+1/2,j}$ une approximation à l'ordre deux de k au point $\frac{M_{i,j} + M_{i+1,j}}{2}$.

Pour les points irréguliers, on utilise le point $M_{i,j}$ et ses plus proches voisins dans chaque direction, qu'il s'agisse de points de grille ou d'interface. Plus précisément, on note u_S^h la valeur de la solution sur le point le plus proche dans la direction sud, de coordonnées (x_S, y_S) . De même, on définit u_N^h , u_W^h et u_E^h et les coordonnées associées (x_N, y_N) , (x_W, y_W) et (x_E, y_E) . La discrétisation est

$$\begin{aligned} -(\nabla \cdot (k \nabla u))_{i,j}^h &= -(\nabla \cdot (k \nabla u))^h(x_i, y_j) \\ &= -k_{i,j} \left(\frac{u_N^h - u_{i,j}^h}{x_N - x_i} - \frac{u_{i,j}^h - u_S^h}{x_i - x_S} \right) \frac{2}{x_N - x_S} - k_{i,j} \left(\frac{u_E^h - u_{i,j}^h}{y_E - y_j} - \frac{u_{i,j}^h - u_W^h}{y_j - y_W} \right) \frac{2}{y_E - y_W}. \end{aligned} \quad (\text{III.1.5})$$

avec $\tilde{k}_{i+1/2,j}$ une approximation de k sur le milieu de $[I_{i+1/2,j}, M_{i,j}]$.

L'erreur de troncature de cette discrétisation est d'ordre deux sur les points de grille réguliers, et d'ordre un sur les points de grille irréguliers.

III.1.1.2 Conditions discrètes de saut sur les flux

Conditions de saut au travers de l'interface On discrétise les conditions de saut (III.1.2) et (III.1.3) sur chaque point d'interface $I_{i+1/2,j}$ par :

$$u_{i+1/2,j}^{2,h} - u_{i+1/2,j}^{1,h} = \alpha(I_{i+1/2,j}), \quad (\text{III.1.6})$$

$$k_2(\partial_n u^2)_{i+1/2,j}^h - k_1(\partial_n u^1)_{i+1/2,j}^h = \beta(I_{i+1/2,j}), \quad (\text{III.1.7})$$

et de manière similaire pour chaque point d'interface $I_{i,j+1/2}$. Pour obtenir une convergence à l'ordre deux, il est communément admis qu'il faut une discrétisation des flux dans l'équation (III.1.3) qui soit à l'ordre deux. On peut observer un exemple de configuration de l'interface sur la figure III.1. La dérivée partielle en x est facilement approximée à l'ordre deux avec trois points, par exemple, du côté gauche de l'interface, avec les $M_{i-1,j}$, $M_{i,j}$ et $I_{i+1/2,j}$:

$$\frac{\partial u^l}{\partial x}(\tilde{x}_{i+1/2,j}, y_j) \approx \frac{(u_{i-1,j} - \tilde{u}_{i+1/2,j})(x_i - \tilde{x}_{i+1/2,j})}{dx(x_{i-1} - \tilde{x}_{i+1/2,j})} - \frac{(u_{i,j} - \tilde{u}_{i+1/2,j})(x_{i-1} - \tilde{x}_{i+1/2,j})}{dx(x_i - \tilde{x}_{i+1/2,j})} \quad (\text{III.1.8})$$

La dérivée partielle en x à droite $\frac{\partial u^r}{\partial x}(\tilde{x}_{i+1/2,j}, y_j)$ est approximée de manière similaire. Pour les dérivées en y , nous ne disposons pas d'inconnues situées sur la ligne parallèle à l'axe des y et passant par $I_{i+1/2,j}$. On utilise donc un stencil plus étendu, sous forme d'une combinaison linéaire de $(\frac{\partial u}{\partial y})_{i,j}$ et $(\frac{\partial u}{\partial y})_{i-1,j}$, définis respectivement comme des approximations d'ordre deux de la dérivée en y en $M_{i,j}$ et $M_{i-1,j}$:

$$\frac{\partial u^l}{\partial y}(\tilde{x}_{i+1/2,j}, y_j) \approx \frac{\tilde{x}_{i+1/2,j} - x_{i-1}}{dx} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_{i,j} - \frac{\tilde{x}_{i+1/2,j} - x_i}{dx} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_{i-1,j} \quad (\text{III.1.9})$$

Les formules pour $(\frac{\partial u}{\partial y})_{i,j}$ et $(\frac{\partial u}{\partial y})_{i-1,j}$ dépendent de la configuration locale, mais sont calculées sur le même principe que (III.1.8).

Les formules (III.1.8) et (III.1.9) sont consistantes si le point $M_{i-1,j}$ appartient au même sous-domaine que $M_{i,j}$. Il faut donc qu'il y ait au moins deux points adjacents dans chaque direction qui appartiennent au même domaine. Si ce n'est pas le cas, on utilise une discrétisation d'ordre un qui implique seulement trois points et qu'il est toujours possible de réaliser. Des détails sur cette discrétisation d'ordre un seront fournis lors de l'étude de la convergence de la méthode

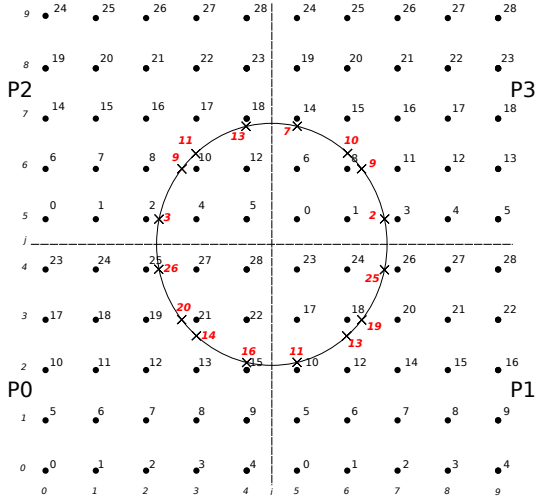


FIGURE III.3 – Exemple de numérotation locale (cas de 4 processeurs). Les points d’interface sont en rouge.

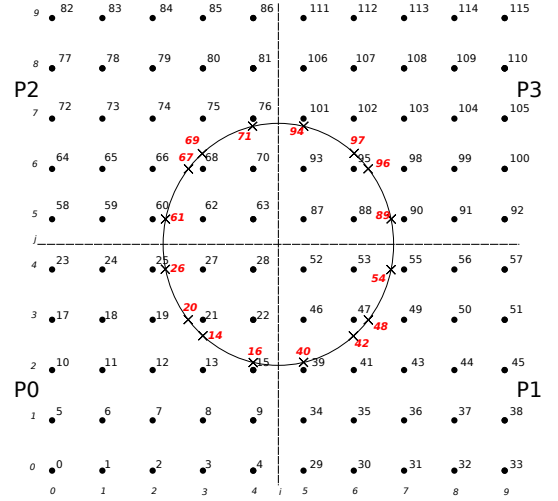


FIGURE III.4 – Exemple de numérotation globale (cas de 4 processeurs). Les points d’interface sont en rouge.

avec cette discrétisation d’ordre un dans la section III.4. A noter aussi que plusieurs stencils sont possibles pour obtenir une discrétisation des flux d’ordre deux. Celui que nous avons choisi a l’avantage de pouvoir être utilisé de manière systématique dès que la condition énoncée ci-dessus est vérifiée. Mais d’autres sont possibles, qui pourraient, comme on le verra dans la suite du document, présenter des avantages pour la monotonie de la matrice de discrétisation, intervenant dans l’étude de la convergence de la méthode.

La condition de transmission sur les flux (III.1.1) correspondant au cas décrit sur la figure III.1 droite est discrétisée par :

$$[k^l(\frac{\partial u^l}{\partial x})_{i+1/2,j} - k^r(\frac{\partial u^r}{\partial x})_{i+1/2,j}] n_x + [k^l(\frac{\partial u^l}{\partial y})_{i+1/2,j} - k^r(\frac{\partial u^r}{\partial y})_{i+1/2,j}] n_y = 0 \quad (\text{III.1.10})$$

avec (n_x, n_y) le vecteur normal à l’interface sur le point $I_{i+1/2,j}$, k^l et k^r respectivement les valeurs limites gauche et droite de k sur $I_{i+1/2,j}$.

Dans le cas où le stencil décrit précédemment pour exprimer une dérivée normale discrète utilise plus d’un point d’interface, on décentre ce stencil pour éviter cette configuration qui détériore le conditionnement de la matrice et produit des oscillations parasites, ainsi que nous l’avons observé en pratique.

III.1.1.3 Parallélisation

La méthode a été parallélisée avec MPI et la librairie PETSc [8]. L’utilisation de la librairie PETSc simplifie la programmation car elle fournit des structures de calcul parallèle et des outils pour les manipuler, en particulier des solveurs linéaires itératifs. Le domaine de calcul est décomposé en sous-domaines gérés chacun par un processeur. La communication de part et d’autre des bords des sous-domaines se fait en ajoutant des régions fantômes contenant les points sur les bords des sous-domaines voisins. Les processeurs communiquent entre eux pour mettre à jour ces régions fantômes.

La structure de la matrice de discrétisation dépend de la position de l’interface et de la numérotation des points d’interface réalisée par PETSc. Chaque processeur reçoit un nombre de lignes du système linéaire total égal au nombre de points de grille et d’interface dans un sous-domaine, même si ce nombre peut varier d’un sous-domaine à l’autre. Ainsi, les communications entre processeurs prennent bien place aux frontières entre les sous-domaines.

La recherche des points d’interface est locale, c’est-à-dire que chaque processeur l’effectue dans son propre sous-domaine. Cependant, cette numérotation locale sur chaque processeur n’est pas compatible avec des manipulations globales de ces points d’interfaces, car plusieurs points d’interface peuvent porter le même indice. Par conséquent, on utilise aussi une numérotation globale. Les Figures III.3 et III.4 illustrent dans un cas particulier la numérotation locale et globale des points de grilles et des points d’interface.

III.1.2 Validation numérique

Dans la version séquentielle, les systèmes linéaires sont résolus avec des fonctions issues de la librairie SPARSKIT [147] : une méthode GMRES avec un préconditionnement ILU. Dans les tests suivants, on considère un domaine carré Ω qui est l'union des sous-domaines Ω_1 et Ω_2 séparés par une interface Σ . Sauf spécifié autrement, $\Omega = [-1, 1] \times [-1, 1]$, et on impose des conditions de Dirichlet exactes sur la frontière extérieure de Ω .

Le premier test a été étudié dans plusieurs références : [110], [25], [171], [116] et [87], ainsi que sous une forme légèrement différente dans [175]. L'interface Σ est un cercle défini par

$$r^2 = 1/4$$

avec $r = \sqrt{x^2 + y^2}$. Le coefficient k varie en espace :

$$k(x, y) = \begin{cases} r^2 + 1 & \text{à l'intérieur de } \Sigma \\ b & \text{sinon.} \end{cases}$$

La solution exacte est :

$$u(x, y) = \begin{cases} r^2 & \text{à l'intérieur de } \Sigma \\ (1 - \frac{1}{8b} - \frac{1}{b})/4 + (\frac{r^4}{2} + r^2)/b + C \log(2r)/b & \text{sinon,} \end{cases}$$

avec b un paramètre qui apparait dans la formule pour le coefficient k et pour la solution u , et qu'on fait varier : $b = 10$, 1000 et 0.001. Le terme source est :

$$f(x, y) = 8(x^2 + y^2) + 4.$$

Les ordres de convergence sont présentés dans les tableaux III.1 et III.2. On observe une convergence à l'ordre deux.

N	Nouvelle méthode	Ordre	DIIM [25]	MIIM [116]	CIM [87]
32	1.825×10^{-4}	-	2.083×10^{-4}	5.136×10^{-4}	2.732×10^{-4}
64	4.965×10^{-5}	1.88	5.296×10^{-5}	8.235×10^{-5}	3.875×10^{-5}
128	1.304×10^{-5}	1.90	1.330×10^{-5}	1.869×10^{-5}	5.337×10^{-6}
256	3.333×10^{-6}	1.92	3.330×10^{-6}	4.026×10^{-6}	7.241×10^{-7}

TABLE III.1 – Résultats numériques en norme L^∞ pour le problème, $b = 1000$.

N	Nouvelle méthode	Ordre	DIIM [25]	MIIM [116]	CIM [87]
32	2.036×10^0	-	4.971×10^0	9.346×10^0	4.278×10^{-1}
64	3.522×10^{-1}	2.53	1.176×10^0	2.006×10^0	1.260×10^{-1}
128	7.255×10^{-2}	2.41	2.900×10^{-1}	5.808×10^{-1}	3.773×10^{-2}
256	1.807×10^{-2}	2.27	7.086×10^{-2}	1.374×10^{-1}	1.365×10^{-2}

TABLE III.2 – Résultats numériques en norme L^∞ pour le problème 4, $b = 0.001$.

D'autres tests de convergence ont été effectués et peuvent être consultés. Globalement, nous obtenons une précision comparable aux méthodes les plus précises de la littérature [176, 87]. La scalabilité de la version parallélisée de la méthode a également été testée et validée dans [42]. La méthode a ensuite été étendue en trois dimensions, en séquentiel et parallèle.

III.2 Electroporation de cellules biologiques

Ce travail a été effectué en collaboration avec Otared Kavian et Clair Poignard pendant le début de la thèse de Michael Leguëbe, et publié dans [96] et [109].

L'exposition d'une cellule à un champ électrique très intense et très bref (quelques centaines de V/cm pendant quelques dizaines de microsecondes) entraîne une déstructuration de la bicouche lipidique constitutive de la membrane cellulaire.

Cette fragilisation de la membrane la rend plus perméable, on parle d'électroperméabilisation ou encore d'électroporation membranaire. Si les pulses sont trop longs ou trop nombreux ou leur amplitude trop élevée la membrane de la cellule subit des dommages irréversibles. Cependant, si la durée des pulses est suffisamment courte (quelques millisecondes ou microsecondes suivant leur amplitude), la membrane se referme en l'espace de quelques dizaines de minutes : il s'agit alors d'une électroporation réversible qui préserve la viabilité de la cellule. L'introduction de molécules extracellulaires dans le cytoplasme est alors possible. Cette technique de vectorisation de molécules dans la cellule est utilisée en électrochimiothérapie pour le traitement des tumeurs ou pour le transfert de gènes.

Cependant le phénomène est mal compris à l'échelle cellulaire. En particulier, le passage de grosses molécules telles que l'ADN à travers la membrane pose de nombreuses questions et une modélisation précise et en accord avec les expériences reste à développer. Par ailleurs, un manque de résultats numériques cohérents avec les expériences empêche d'utiliser cette technique pour des configurations non-étudiées expérimentalement, plus particulièrement pour des tumeurs situées loin de la surface cutanée. Ce manque est principalement dû à la complexité des modèles usuels d'électroporation à l'échelle de la cellule.

III.2.1 Modèle d'électroperméabilisation

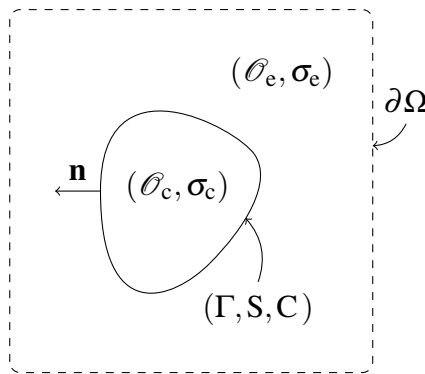


FIGURE III.5 – Géométrie du problème. La cellule Θ_c est plongée dans le bain Θ_e . Le domaine total Ω est défini par $\Omega = \Theta_e \cup \overline{\Theta_c}$.

Dans la littérature, jusqu'à récemment le modèle probablement le plus abouti avait été développé dans les années 2000 par Neu, Krassowska *et al.*. Ce modèle est basé sur l'ajout d'un courant d'électroporation exprimé à l'aide d'une densité locale de pores et du courant passant par un seul pore. Cependant, ce modèle utilise un grand nombre de paramètres non mesurables qui gênent sa comparaison aux expériences. De plus, l'analyse théorique de ce modèle semble difficilement atteignable car certaines de ses inconnues ne peuvent être bornées. Ce modèle fournit donc une description qualitative mais pas quantitative du phénomène d'électroporation.

Plus récemment, Kaviani *et al.* ont proposé un nouveau modèle phénoménologique portant sur la conductivité elle-même, comportant peu de paramètres, et ont réalisé son étude théorique dans [96]. La membrane d'une cellule peut être modélisée comme une surface Γ avec une capacité C et une conductivité surfacique S . Le nouveau modèle de Kaviani *et al.* décrit cette conductivité surfacique avec un modèle de type porte coulissante. Le principe est de définir un degré de porosité X compris entre 0 et 1, permettant de décrire localement l'état de la membrane entre son état au repos et un état de porosité maximale. Le paramètre X suit une équation différentielle fonction du potentiel transmembranaire, et la conductivité de la membrane dépend directement de ce degré de porosité.

On note Θ_c le cytoplasme de la cellule, et Θ_e le milieu extracellulaire. Soit σ la conductivité du milieu, c'est à-dire :

$$\sigma = \begin{cases} \sigma_e, & \text{dans le domaine extérieur } \Theta_e, \\ \sigma_c, & \text{à l'intérieur de la cellule } \Theta_c. \end{cases}$$

Le potentiel électrique vérifie les équations suivantes (III.2.1) :

$$U(0, \cdot) = 0 \quad \text{dans } \Theta_e \cup \Theta_c, \quad (\text{III.2.1a})$$

$$\Delta U = 0, \quad \text{dans } (0, T) \times (\Theta_e \cup \Theta_c), \quad (\text{III.2.1b})$$

$$U(t, \cdot) = g(t, \cdot) \quad \text{sur } (0, +\infty) \times \partial\Omega, \quad (\text{III.2.1c})$$

avec les conditions de saut

$$[\sigma \partial_{\mathbf{n}} U] = 0, \quad \text{sur } (0, T) \times \Gamma, \quad (\text{III.2.1d})$$

$$C \partial_t [U](t, \cdot) + S(t, [U])[U] = \sigma_c \partial_{\mathbf{n}} U(t, \cdot)|_{\Gamma^-}, \quad \text{sur } (0, T) \times \Gamma. \quad (\text{III.2.1e})$$

La conductivité S de la surface membranaire est définie comme une interpolation entre les valeurs S_{ir} et S_L , qui sont respectivement la conductivité de surface d'une région irréversiblement électroperméabilisée, et la conductivité de la surface lipidique :

$$S(t, \lambda) := S_L + (S_{\text{ir}} - S_L)X(t, \lambda), \quad (\text{III.2.1f})$$

avec la fonction X qui satisfait l'équation différentielle suivante (on pose $\lambda(t) := [U(t, s)]$) :

$$\begin{cases} \frac{\partial X(t, \lambda)}{\partial t} = \max \left(\frac{\beta(\lambda(t)) - X(t, \cdot)}{\tau_{\text{ep}}}, \frac{\beta(\lambda(t)) - X(t, \cdot)}{\tau_{\text{res}}} \right), \\ X(0, \lambda) = 0, \end{cases} \quad (\text{III.2.2})$$

où β est une fonction de Heavyside régularisée vérifiant

$$\left. \begin{aligned} \beta &\in W^{1,\infty}(\mathbb{R}), \quad \lambda \mapsto \beta(\lambda) \text{ est paire } \mathbb{R}, \\ \lambda &\mapsto \lambda \beta'(\lambda) \text{ appartient à } L^\infty(\mathbb{R}), \\ 0 &\leq \beta(\lambda) \leq 1, \quad \beta \text{ est non-décroissante sur } (0, +\infty), \\ \lim_{\lambda \rightarrow +\infty} \beta(\lambda) &= 1. \end{aligned} \right\} \quad (\text{III.2.3})$$

La caractéristique principale de ce nouveau modèle est de n'utiliser qu'un nombre réduit de paramètres comparé au modèle de Neu, Krassowska *et al.*, sophistiqué mais comprenant des dizaines de paramètres difficilement mesurables. Par conséquent, il semble plus facile d'ajuster les paramètres de ce modèle à des résultats expérimentaux.

Si le terme source g dans III.2.1 ne dépend pas du temps, alors le point stationnaire (U^*, X^*) du système (III.2.1)–(III.2.2) est l'unique solution du modèle statique inspiré de Ivorra *et al.* qui est aussi présenté dans [96] :

$$\Delta U^* = 0, \quad \text{in } (\mathcal{O}_e \cup \mathcal{O}_c), \quad U^*|_{\partial\Omega} = g \quad \text{on } \partial\Omega, \quad (\text{III.2.4a})$$

$$[\sigma \partial_{\mathbf{n}} U^*] = 0, \quad \text{on } \Gamma, \quad (\text{III.2.4b})$$

$$(S_L + (S_{\text{ir}} - S_L)\beta([U^*(s)])) [U^*] = \sigma_c \partial_{\mathbf{n}} U^*|_{\Gamma^-}, \quad \text{on } \Gamma. \quad (\text{III.2.4c})$$

Dans l'article de Kavian *et al.* [97] on montre que le modèle dynamique (III.2.1) et le modèle statique (III.2.4) possèdent une unique solution sous certaines hypothèses non-restrictives qu'on ne rappelle pas ici. Dans le premier cas, la preuve est basée sur le fait que la solution du problème est le point fixe d'une fonction faisant intervenir les opérateurs de Dirichlet-to-Neumann dans les deux sous-domaines. Dans le second cas, la preuve repose sur le fait que la solution du modèle statique est le minimum d'une fonctionnelle faisant intervenir à nouveau les opérateurs de Dirichlet-to-Neumann dans les deux sous-domaines.

III.2.2 Résolution numérique du modèle d'électroporation

Les équations du modèle (statique ou dynamique) de Kavian *et al.* présentent des similarités avec le problème elliptique résolu dans la section III.1 : des sous-domaines séparés par une interface avec des conditions de saut pour le potentiel électrique et sa dérivée normale au travers de l'interface. Nous avons donc adapté la méthode présentée dans cette section pour résoudre numériquement ce nouveau modèle d'électroporation.

L'utilisation d'inconnues supplémentaires sur l'interface est particulièrement utile dans le cas du modèle d'électroporation car il est nécessaire de connaître la valeur du potentiel électrique transmembranaire avec précision, et certaines données ne sont définies que sur la membrane, comme par exemple la conductivité de la membrane. De plus, l'étude théorique du modèle passe par sa reformulation comme un problème défini uniquement sur la membrane cellulaire, en faisant appel aux opérateurs de Steklov-Poincaré. Il est donc assez naturel pour étudier la méthode numérique de la reformuler également en utilisant des opérateurs de Steklov-Poincaré discrets, et la présence d'inconnues sur l'interface facilite cette reformulation.

III.2.2.1 Discrétisation globale du système

On utilise une discrétisation temporelle semi-implicite d'ordre un pour les équations vérifiées par le potentiel électrique, et un schéma d'Euler explicite pour X . Notons que dans la condition (III.2.1e), il est nécessaire d'impliciter le flux $\partial_n u|_{\Gamma^-}$ pour la discrétisation en temps pour des raisons de stabilité, sinon une condition CFL très restrictive apparait, comme observé dans Guyomarc'h *et al.* [79].

On reprend dans la suite les notations de la section III.1. Le domaine de calcul est un carré discrétisé avec N points dans les directions x et y . On note $(\Delta u)_{ij}$ l'approximation par différences finies du Laplacien sur le point $M_{i,j}$. Par souci de brièveté, on écrit dans la suite les différentes relations pour un point d'interface $I_{i+1/2,j}$. Les mêmes relations sont vérifiées sur chaque point d'interface de type $I_{i,j+1/2}$. La dérivée normale discrète sur le point d'interface $I_{i+1/2,j}$ à l'extérieur (*resp.* à l'intérieur) du domaine est notée $(\partial_n u_e)_{i+1/2,j}$ (*resp.* $(\partial_n u^c)_{i+1/2,j}$). Le système linéaire à résoudre se compose :

- du Laplacien discret sur les points de grille :

$$\forall (i, j) \in \{1, \dots, N\}^2, \forall n \geq 0, \quad (\Delta u)_{ij}^{n+1} = 0. \quad (\text{III.2.5})$$

- des conditions de saut (III.2.1d) :

$$[\sigma(\partial_n u)_{i+1/2,j}^{n+1}] = 0, \quad \forall n \geq 0, \forall I_{i+1/2,j} \in \Sigma_h, \quad (\text{III.2.6})$$

- de l'évolution du potentiel transmembranaire (III.2.1e) :

$$C \frac{[u]_{i+1/2,j}^{n+1} - [u]_{i+1/2,j}^n}{dt} + S_{i+1/2,j}^n [u]_{i+1/2,j}^n = \sigma_c (\partial_n u_c)_{i+1/2,j}^{n+1}, \quad \forall n \geq 0, \forall I_{i+1/2,j} \in \Sigma_h, \quad (\text{III.2.7})$$

avec $S_{i+1/2,j}^n = S_L + (S_{ir} - S_L) X_{i+1/2,j}^n$,

- et de l'évolution du coefficient X :

$$X_{i+1/2,j}^{n+1} = X_{i+1/2,j}^n + dt \max \left(\frac{\beta([u]_{i+1/2,j}^n - X_{i+1/2,j}^n)}{\tau_{ep}}; \frac{\beta([u]_{i+1/2,j}^n) - X_{i+1/2,j}^n}{\tau_{res}} \right), \quad \forall n \geq 0, \forall I_{i+1/2,j} \in \Sigma_h. \quad (\text{III.2.8})$$

Les conditions initiales sont $u^0 = 0$ et $X^0 = 0$. On impose des conditions aux limites de Dirichlet sur le bord extérieur du domaine de calcul.

III.2.3 Convergence de la méthode en une dimension

Nous avons étudié les propriétés de convergence de la méthode en une dimension, pour les cas statique et dynamique.

III.2.3.1 Cas statique

Proposition III.2.1. *La solution numérique du problème statique converge à l'ordre deux en norme L^∞ vers la solution exacte pour la formulation en une dimension.*

Preuve On note A_h la matrice de discrétisation du système linéaire correspondant à la discrétisation du problème stationnaire. Soit u un vecteur tel que $Au \geq 0$, pour montrer que A_h est monotone, on cherche à montrer que $u \geq 0$. Pour cela, on montre que si le minimum est localisé sur un point de grille, alors le minimum est aussi atteint sur les voisins directs du point de grille. Si le minimum est sur un point d'interface, on montre que les valeurs sur tous les points du stencil pour le saut des flux sont égales, en utilisant les inégalités sur les flux discrets combinées aux inégalités pour les Laplaciens discrets sur les points voisins. Pour cela, une étape importante est de montrer que si le minimum de u se trouve sur un point d'interface intérieur, alors avec les conventions choisies la dérivée normale sur ce point d'interface est négative. Finalement, la seule possibilité pour le minimum est donc de se trouver sur un point situé sur le bord extérieur du domaine, et on finit par montrer que ce minimum est forcément positif.

On construit ensuite un vecteur v tel que $Av = (1, 1, \dots, 1, 1)^t$ afin d'obtenir une estimation de la norme infinie de l'inverse de A_h :

$$\|A^{-1}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq N} \sum_{j=1}^N a_{i,j}^{-1} = \max_{1 \leq i \leq N} v_i = O(1).$$

On note z la i -ème ligne de A^{-1} . Les coefficients de z correspondant aux points d'interface sont d'amplitude $O(1)$. Par des manipulations explicites du système linéaire vérifié par z , on exprime ses autres coefficients de manière récursive et on montre qu'ils sont d'amplitude $O(h)$. L'erreur de troncature étant $O(h^2)$ pour les flux, $O(h)$ pour le laplacien près de l'interface, et $O(h^2)$ ailleurs, on obtient la convergence à l'ordre deux. \square

III.2.3.2 Cas dynamique

Proposition III.2.2. *Si le ratio dt/h est constant, si $dt < \tau_{ep}$ et $|1 - \frac{dt}{C}S| < 1$ pour toutes les valeurs de $(S)_{i+1/2,j}$ et $(S)_{i,j+1/2}$, alors la solution numérique du problème dynamique converge à l'ordre deux en norme L^∞ vers la solution exacte pour la formulation en une dimension.*

Preuve On note A_h la matrice de discrétisation du système linéaire correspondant à la discrétisation du problème stationnaire. La convergence dans le cas 1D linéaire de la méthode pour le modèle dynamique suit un raisonnement similaire à celui de la preuve d'existence dans le cas continu. On se ramène à une formulation équivalente mais qui ne fait intervenir que les valeurs sur l'interface, en utilisant des opérateurs Dirichlet-to-Neumann discrets. Notamment, on montre que la matrice du système linéaire représentant le nouveau problème formulé sur l'interface est symétrique et que son rayon spectral est strictement inférieur à un. La stabilité de la méthode numérique en résulte. \square

Pour obtenir la convergence de la méthode en deux dimensions, il manque la preuve de la monotonie de la matrice en deux dimensions, ainsi que cela sera davantage expliqué dans la section III.4.

III.2.4 Validations numériques

Les paramètres utilisés dans les simulations effectuées sont pour partie des paramètres biologiques, dont les valeurs sont fixées par des références de la littérature, et pour partie des paramètres spécifiques au nouveau modèle, voir [97] pour plus de détails.

III.2.4.1 Tests de convergence

Des tests numériques en deux dimensions pour les cas statique et dynamique linéaire, pour lesquels des solutions exactes peuvent être construites, montrent une convergence à l'ordre deux vis à vis du pas d'espace. Dans le cas non-linéaire en deux dimensions, où la conductivité dépend de la différence de potentiel transmembranaire, une étude numérique montre une convergence à l'ordre un, ce qui est cohérent avec le fait que la discrétisation en temps est d'ordre un et que le schéma satisfait une condition de type CFL.

III.2.4.2 Etude numérique du nouveau modèle

Nous avons effectué une série d'expériences numériques pour évaluer le comportement du modèle par rapport à ses paramètres et par rapport à la littérature.

- **Influence du paramètre S_{ir}** : Ce paramètre représente la conductivité de la membrane complètement électroporée, il est difficilement mesurable par des expériences. Il est donc important d'évaluer son influence sur le comportement du modèle. Nous avons montré que S_{ir} a peu d'influence sur la conductivité membranaire S , car la valeur de X compense la variation de S_{ir} .
- **Comparaison à Ivorra *et al.*** : Nous avons comparé nos résultats pour le modèle statique aux simulations d'Ivorra *et al.* en étudiant l'influence de la conductivité du milieu extracellulaire sur la conductivité de la membrane. Nos résultats sont similaires à ceux de la Figure 7 de [90]. Remarquons que pour réaliser leurs simulations, Ivorra *et al.* ont multiplié par dix l'épaisseur de la membrane. C'est pourquoi le champ utilisé pour perméabiliser la membrane est de l'ordre de 2MV/m, ce qui est beaucoup plus grand que les valeurs utilisées dans les dispositifs expérimentaux, typiquement de l'ordre de 20 à 30 kV/m. En comparaison, le nouveau modèle permet de simuler des conditions plus réalistes.
- **Résultats typiques du modèle dynamique** : Les Figures III.6(a) et III.6(b) présentent des résultats typiques obtenus avec le nouveau modèle. Le champ électrique est visualisé avec des lignes alors que la conductivité de la membrane est représentée sur chaque point de Γ à $t = 100 \mu s$ par une échelle allant du blanc au noir et par l'épaisseur plus ou moins forte de la membrane, qui est donc un artefact de visualisation.
- **Comparaison à Neu, Krassowska, *et al.*** : Le modèle de Neu, Krassowska, *et al.* étant considéré comme le plus abouti pour des micro- ou millipulses, il est important de vérifier que le nouveau modèle produit des résultats similaires. La principale différence entre le modèle de Neu, Krassowska, *et al.* et le nouveau modèle réside dans l'utilisation dans le premier cas d'un courant d'électroporéméabilisation $I_{ep} = N_{ep}i_{ep}$, au lieu d'une description directe des variations de la conductivité membranaire.

L'équation satisfaite par le saut de potentiel transmembranaire dans le modèle de Neu, Krassowska, *et al.* [56] s'écrit

$$-\sigma_c \partial_n U_c = C \partial_t [U] + S_L [U] + N_{ep} i_{ep}, \quad (III.2.9)$$

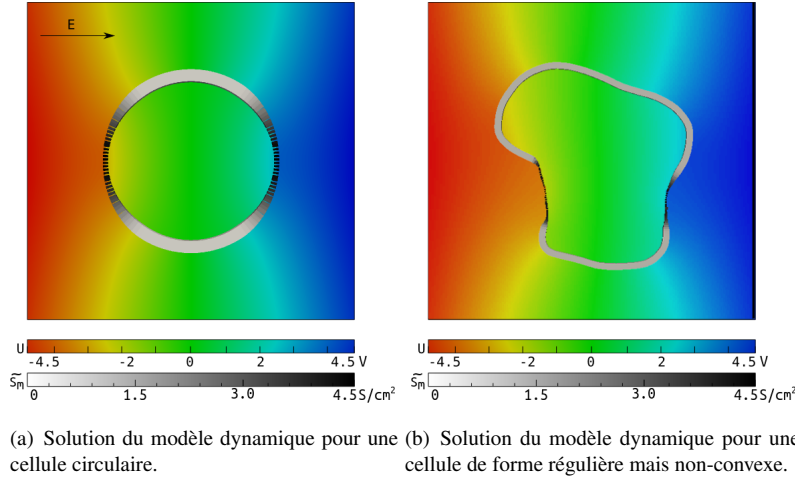


FIGURE III.6 – Solution du modèle dynamique pour deux cellules de formes différentes à $t = 100 \mu s$. La localisation des régions perméabilisées dépend de la forme et de l'orientation de Γ .

N_{ep} étant la densité de pores et i_{ep} le courant à travers un seul pore.

Le nouveau modèle reproduit qualitativement le comportement du saut du potentiel au travers de la membrane, comme illustré Figure III.7(a). Sur la Figure III.7(b), on voit que la variation de la densité de courant membranaire $S[U]$ obtenue avec le nouveau modèle est semblable à la densité de courant d'électroporation $N_{ep}i_{ep}$ dans [56].

Les nouveaux modèles statique et dynamique produisent donc des résultats en accord avec ceux de référence dans la littérature : la simplification effectuée n'a pas nuit à la précision des prédictions.

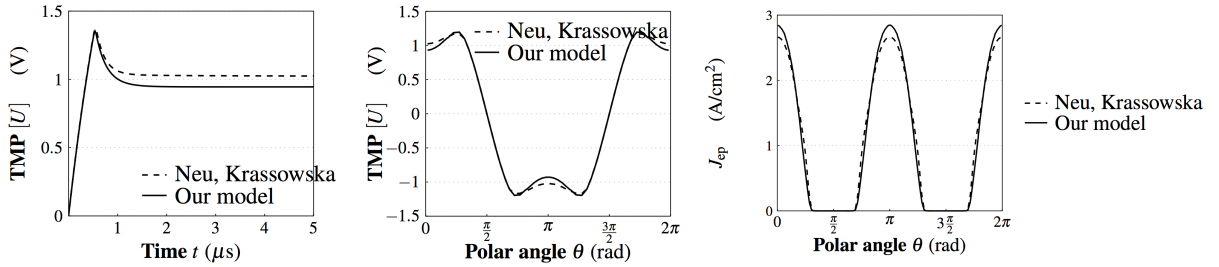


FIGURE III.7 – Comparaison entre le nouveau modèle et le modèle de Neu, Krassowska *et al.*

Dans la suite de son travail, Michael Leguèbe a enrichi le modèle d'électroporation pour différencier les états conducteur et perméable de la membrane. En effet, la hausse considérable de conductivité membranaire pendant les pulses ne dure que quelques microsecondes, tandis que la perméabilisation des cellules peut durer jusqu'à une heure après l'application des pulses. Par ailleurs, le moyen de détection de la perméabilisation le plus efficace et le plus facile est l'internalisation par les cellules d'un agent cytotoxique ou d'un marqueur fluorescent. Or l'ensemble des modèles d'électroporation ne donnent qu'une information sur la conductivité membranaire. Michael a donc ajouté un modèle de transport et de diffusion des molécules autour et à l'intérieur de la cellule pour reproduire numériquement les observations expérimentales.

III.3 Simulation d'écoulements bifluides avec forts ratios de densité

Dans ce travail, effectué en collaboration avec Michel Bergmann, publié partiellement en proceeding de conférence [20] et soumis pour publication [22], nous avons adapté la méthode de la section III.1 pour résoudre sans régularisation des écoulements avec de forts contrastes de densité entre les fluides. Cette méthode est utilisée ici pour résoudre l'étape de calcul de la pression avec une précision d'ordre deux. Le code "NaSCar", développé principalement par Michel Bergmann, permet de résoudre en deux et trois dimensions des écoulements incompressibles autour d'obstacles déformables en

mouvement, avec une discrétisation sur grille cartésienne, des variables colocalisées et une précision d'ordre deux près de l'interface fluide-solide. Par contre, "NaSCar" a été conçu pour des écoulements monofluides. Donc pour résoudre des écoulements diphasiques avec des rapports de masse volumique importants, par exemple 1000 dans le cas d'une interface eau-air, il est actuellement nécessaire de régulariser fortement les discontinuités apparaissant à l'interface, ce qui détériore la précision des calculs. Cette approche par régularisation constitue une réponse possible aux problèmes de consistance des schémas numériques près de l'interface entre les fluides. Dans cette classe de méthodes, la plus connue est la méthode "Continuous Surface Force" (CSF) [29]. Dans la méthode CSF les quantités discontinues sont régularisées près de l'interface, et dans le cas d'un fluide avec tension de surface, cette tension de surface est prise en compte comme la limite d'une force volumique. Cette méthode est très utilisée (par exemple [154] et [71]) parce qu'elle permet d'adapter rapidement un code monofluide déjà existant à la présence de deux fluides. Cependant, la manière exacte de pratiquer cette régularisation n'est pas toujours claire, et des oscillations parasites peuvent se manifester à l'interface entre les fluides, dues aux erreurs causées par la régularisation dans le calcul du gradient de la pression près de cette interface.

Une autre méthode introduite par Kang, Fedkiw et Liu [95] est la méthode Ghost Fluid (GFM), elle aussi très largement utilisée, par exemple dans [72], [51] et [156]. Elle repose sur l'utilisation d'une méthode d'ordre un développée dans [118] pour résoudre la pression, basée sur un splitting directionnel, facile à implanter, et produisant une matrice symétrique. Un inconvénient de cette méthode est qu'elle est non-conservative et seulement d'ordre un près de l'interface. La perte de conservativité peut conduire à des transferts erronés de quantité de mouvement entre les fluides suffisamment forts pour produire une mauvaise évaluation des vitesses, ainsi que constaté par exemple dans [143], voire des problèmes de stabilité dans les cas les plus sévères.

Pour contrer ces problèmes de conservativité, qui semblent exacerbés dans le cas de schémas sur maillages décalés [102], une autre famille de méthodes utilise la forme conservative des équations de Navier-Stokes, avec laquelle la masse et la quantité de mouvement de chaque fluide sont explicitement calculées près de l'interface, comme par exemple dans [145], [152], [153], [85] et récemment [143]. Dans ce dernier travail, Raessi et Pitsch ont développé une méthode numérique basée sur une approche Level Set conservative pour la capture de l'interface et un schéma consistant pour le transport de la masse et la quantité de mouvement. De même, dans [102] le schéma CM-MoM (Consistent Mass-MoMentum transport) utilise une fonction VoF sous-maille pour calculer une quantité de matière locale sur le volume de contrôle de vitesse. Cette quantité de matière et la quantité de mouvement sont ensuite advectées simultanément et de manière consistante. Ces schémas permettent de simuler des écoulements avec des rapports de masse volumique très importants. Pour toute cette classe de méthodes, une représentation explicite de l'interface est nécessaire. Le prix à payer pour leur stabilité accrue est donc un travail algorithmique plus important pour reconstruire l'interface et les propriétés des fluides dans son voisinage.

Dans le travail présenté ici nous avons cherché un compromis entre précision, stabilité, et complexité d'implantation de la méthode, tout en restant compatible avec les choix méthodologiques déjà effectués dans "NaSCar". Nous souhaitons préserver le plus possible la simplicité de la méthode Ghost-Fluid, donc sans chercher à être parfaitement conservatif près de l'interface, tout en améliorant la résolution de la pression, ce qui a des conséquences positives sur la stabilité et la conservativité.

Remarquons que pour ce type d'écoulements, il y a en pratique de nombreux choix méthodologiques à faire pour les différentes étapes, telles que la résolution des termes de convection, des termes visqueux, de la pression, l'évolution de l'interface : la présence ou non de maillages décalés, la précision des différentes discrétisations, le caractère implicite ou non, conservatif ou non, etc. Plus la méthode est sophistiquée, plus le nombre de ces choix augmente. Il est alors de plus en plus difficile de comprendre leur influence respective, et les évolutions méthodologiques ultérieures peuvent se retrouver contraintes par les choix déjà effectués. Par exemple, utiliser une version incrémentale pourrait être intéressant pour améliorer la précision de l'étape de prédiction près de l'interface et la convergence en temps de la méthode, ainsi que le traitement des conditions aux limites pendant le calcul de la pression. Mais c'est une modification qui sera d'autant plus compliquée à envisager que le traitement des termes convectifs et visqueux fait appel à des schémas sophistiqués, en particulier dans le cas de l'utilisation d'une formulation conservative des équations de Navier-Stokes.

III.3.1 Présentation de la méthode

III.3.1.1 Les équations à résoudre

On se place dans un domaine Ω rempli de deux fluides visqueux incompressibles, avec des densités et viscosités différentes. Les sous-domaines Ω^- et Ω^+ correspondant à ces deux fluides sont séparés par une interface nommée Γ , voir la figure III.14. La normale à l'interface est notée \mathbf{n} et la tangente à cette même interface $\boldsymbol{\eta}$. Le fluide est modélisé dans

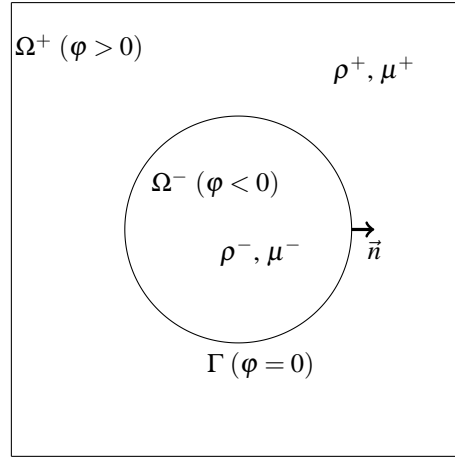


FIGURE III.8 – Ecoulements bifluides : notations pour les variables dans les deux sous-domaines.

chaque sous-domaine par les équations de Navier-Stokes incompressible :

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{u}_t + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}) &= -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g}, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0,\end{aligned}$$

avec \mathbf{g} le vecteur de l'accélération gravitationnelle et $\boldsymbol{\tau}$ le tenseur des contraintes visqueuses :

$$\boldsymbol{\tau} = \mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T).$$

Ces équations sont complétées par plusieurs conditions de saut au travers de l'interface Γ :

- l'équilibre entre les contraintes normales à l'interface et la tension de surface σ

$$[p - 2\mu(\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n}] = \sigma \kappa, \quad (\text{III.3.1})$$

$$[\mu(\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\eta} + (\nabla \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\eta}, \nabla \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\eta}) \cdot \mathbf{n}] = 0. \quad (\text{III.3.2})$$

- la continuité de la vitesse au travers de l'interface (pour un fluide visqueux), et sa dérivée matérielle :

$$[u] = 0, \quad (\text{III.3.3})$$

$$[v] = 0. \quad (\text{III.3.4})$$

$$\left[\frac{\nabla p}{\rho} \right] = \left[\frac{\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}}{\rho} \right]. \quad (\text{III.3.5})$$

- la condition de saut pour la pression p peut être simplifiée en utilisant (III.3.3) et (III.3.4) et la propriété de divergence nulle de la vitesse dans chaque sous-domaine :

$$[p] = 2[\mu](\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} + \sigma \kappa. \quad (\text{III.3.6})$$

III.3.1.2 Méthode numérique dans le fluide

Dans le code "NaSCar", les équations de Navier Stokes sont résolues avec un schéma classique de type prédicteur-correcteur [39, 157]. Nous l'utilisons dans le cadre de ce travail en version non-incrémentale, c'est-à-dire sans tenir compte de la pression dans la phase de prédiction. Ce choix évite de chercher quelles devraient être les conditions de saut pour la correction de la pression au travers de l'interface une fois le gradient de la pression prédite appliqué, faute de quoi des instabilités dues à la discontinuité de la pression apparaissent quand l'interface bouge. En effet, ces conditions de saut pour la correction de la pression reposent sur des considérations numériques et non pas physiques, et ne sont pas évidentes à trouver. On calcule donc successivement :

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -(\mathbf{u}^n \cdot \nabla)\mathbf{u}^n + \frac{1}{\rho}(\nabla \cdot \boldsymbol{\tau})^n + \mathbf{g} \quad (\text{prédiction}), \quad (\text{III.3.7})$$

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{\nabla p}{\rho} \quad (\text{correction}). \quad (\text{III.3.8})$$

L'intégration en temps est réalisée avec un schéma d'Euler explicite d'ordre un. Un ordre plus élevé pourrait sembler souhaitable, mais le fait d'utiliser une version non-incrémentale restreint de toute manière la précision à l'ordre un.

III.3.1.3 Etape de prédiction

Les termes convectifs sont calculés avec un schéma WENO d'ordre cinq, ainsi que ceux pour la level-set qui est transportée par la vitesse du fluide \mathbf{u} . La fonction level-set est redistanciée tous les quelques pas de temps en procédant à quelques itérations d'une méthode de relaxation classique, discrétisée avec un schéma de Runge-Kutta d'ordre trois et un schéma WENO5 pour les dérivées spatiales.

Nous avons choisi d'appliquer une régularisation sur la viscosité et la densité ainsi que dans [143], les termes visqueux étant alors discrétisés par des différences finies explicites centrés d'ordre deux. Il a été montré dans [57] et [83] que cette approche par régularisation donne une précision correcte pour des nombres de Reynolds élevés. Une approche sans régularisation pour ces termes visqueux améliorerait probablement la précision des simulations, mais compliquerait leur traitement si on souhaitait les implémenter.

III.3.1.4 Calcul de la pression et étape de correction

La pression est calculée via la résolution d'une équation de Poisson de manière à imposer la condition de divergence nulle de la vitesse. Sur chaque point de grille qui ne voisine pas directement l'interface, la pression doit satisfaire :

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t}, \quad (\text{III.3.9})$$

avec la condition aux limites de Neumann :

$$\frac{\nabla p}{\rho} = \frac{\mathbf{u}^b - \mathbf{u}^*}{\Delta t}, \quad (\text{III.3.10})$$

avec \mathbf{u}^b la valeur de la vitesse qu'on souhaite imposer sur le bord du domaine de calcul, et les conditions de saut suivantes au travers de l'interface

$$[p] = \sigma \kappa \text{ sur } \Gamma, \quad (\text{III.3.11})$$

$$\left[\frac{\nabla p}{\rho} \right] = 0 \text{ sur } \Gamma, \quad (\text{III.3.12})$$

Les termes liés à la viscosité ont disparu de ces équations grâce à la régularisation qui a été effectuée dans l'étape de prédiction et qui permet de traiter les termes visqueux près de l'interface pendant la prédiction. Sans cette étape de régularisation, il faudrait discrétiser les conditions de saut pour les termes visqueux (III.3.2, qui impliquent des dérivées des composantes de la vitesse dans les directions normale et tangentielle, ce qui augmenterait la complexité de la méthode.

III.3.1.5 Discrétisation près de l'interface

Pour calculer la divergence de la vitesse prédite, et comme les dérivées de la vitesse ne sont pas forcément continues au travers de l'interface, nous utilisons un schéma décentré d'ordre un de chaque côté de l'interface.

De même que dans la section III.1, on crée des inconnues supplémentaires sur les points d'intersection entre l'interface et les axes de la grille. On reprend ici les notations de cette section. Sur chaque point d'interface, on crée deux inconnues supplémentaires pour la pression, appelées inconnues d'interface et notées $p_{i+1/2,j}^{\pm}$ ou $p_{i,j+1/2}^{\pm}$. L'opérateur elliptique de III.3.9 est discrétisé sur chaque point de grille $M_{i,j}$ avec un stencil classique à cinq points, comprenant $M_{i,j}$ et ses plus proches voisins dans chaque direction, que ce soient des points de grille ou des points d'interface. Pour relier les valeurs de part et d'autre de l'interface, nous discrétisons III.3.11 et III.3.12, projetées dans une direction, en utilisant les inconnues d'interface pour la pression. Comme nous utilisons une grille cartésienne, il est naturel de discrétiser les dérivées en x ou en y plutôt que des dérivées dans d'autres directions. On discrétise donc les conditions de saut suivantes sur chaque point d'interface $I_{i+1/2,j}$ (ou $I_{i,j+1/2}$) :

$$p_{i+1/2,j}^+ - p_{i+1/2,j}^- = \sigma \kappa_{i+1/2,j}, \quad p_{i,j+1/2}^+ - p_{i,j+1/2}^- = \sigma \kappa_{i,j+1/2}, \quad (\text{III.3.13})$$

$$\frac{1}{\rho^+} (\partial_x p^+)_{i+1/2,j} - \frac{1}{\rho^-} (\partial_x p^-)_{i+1/2,j} = 0, \quad (\text{III.3.14})$$

$$\frac{1}{\rho^+} (\partial_y p^+)_{i,j+1/2} - \frac{1}{\rho^-} (\partial_y p^-)_{i,j+1/2} = 0. \quad (\text{III.3.15})$$

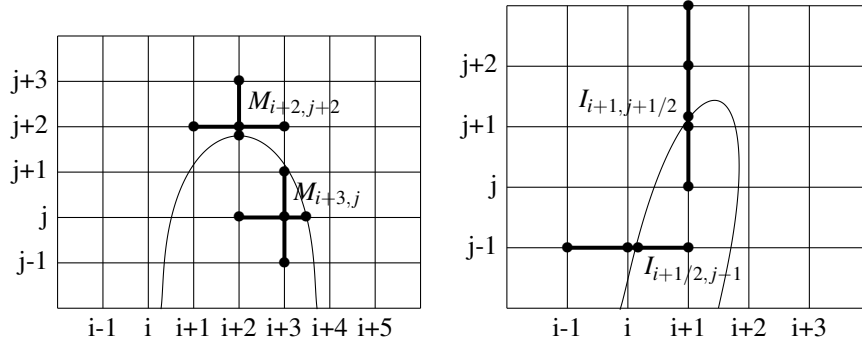


FIGURE III.9 – Gauche : en noir, points impliqués dans la discrétisation de l'opérateur elliptique sur les points de grille $M_{i+2,j+2}$ et $M_{i+3,j}$, droite : en noir, points impliqués dans la discrétisation des conditions de saut sur les points d'interface $I_{i+1/2,j-1}$ et $I_{i+1,j+1/2}$. Pour $I_{i+1/2,j-1}$ les deux dérivées se calculent avec une précision d'ordre deux alors que pour $I_{i+1,j+1/2}$ la dérivée de gauche est calculée à l'ordre deux et la dérivée de droite à l'ordre un seulement.

La discrétisation utilise trois points (en comptant le point d'interface lui-même) pour chaque dérivée et est à l'ordre deux. On peut montrer que la matrice résultant de cette discrétisation est monotone.

Enfin, le gradient de la pression p obtenue par la résolution du problème elliptique est calculé avec un schéma décentré pour les points près de l'interface, en utilisant les valeurs de p sur l'interface.

III.3.2 Validation numérique

III.3.2.1 Oscillations parasites

Une bulle au repos est située au centre du domaine de calcul. Les erreurs dues à l'approximation numérique du calcul de la courbure dans le second membre de (III.4.11) produisent de petites erreurs dans la résolution de la pression, qui créent à leur tour des valeurs non-nulles pour la vitesse au voisinage de l'interface, appelées courants parasites. L'amplitude de ces courants parasites procure une indication sur la stabilité et la précision de la méthode numérique, particulièrement pour l'étape de calcul de la pression, puisque c'est la seule source d'erreur au cours des premiers pas de temps.

Nous utilisons les mêmes paramètres que dans [51], où une méthode Ghost-Fluid et une méthode CSF ont été testées. L'amplitude des courants parasites comparée aux résultats de [51] est présentée dans le Tableau III.3. L'amplitude des courants parasites générés par la nouvelle méthode est de plusieurs ordre de grandeur plus faible que pour la méthode CSF, et significativement plus basse que pour la méthode Ghost-Fluid quand la grille est raffinée.

$$\left\{ \begin{array}{l} L = 2 \text{ cm}, \\ R = 1 \text{ cm}, \\ \rho_{int} = 1000 \text{ kg.m}^{-3}, \\ \mu_{int} = 10^{-3} \text{ Pa.s}, \\ \rho_{ext} = 1 \text{ kg.m}^{-3}, \\ \mu_{ext} = 10^{-5} \text{ Pa.s}, \\ \sigma = 0.1 \text{ N.m}^{-1} \end{array} \right. \quad (\text{III.3.16})$$

N	Méthode Ghost Fluid		CSF		Nouvelle méthode	
	L^∞ erreur	L^2 erreur	L^∞ erreur	L^2 erreur	L^∞ erreur	L^2 error
16	8.08×10^{-3}	1.88×10^{-3}	3.55×10^{-2}	1.94×10^{-2}	5.21×10^{-3}	7.31×10^{-5}
32	3.42×10^{-4}	7.50×10^{-5}	3.12×10^{-2}	1.18×10^{-2}	9.26×10^{-5}	1.42×10^{-6}
64	5.13×10^{-5}	7.97×10^{-6}	2.12×10^{-2}	5.44×10^{-3}	1.36×10^{-5}	1.47×10^{-7}
128	2.79×10^{-5}	4.74×10^{-6}	6.44×10^{-3}	1.38×10^{-3}	2.22×10^{-6}	1.92×10^{-8}

TABLE III.3 – Comparaison entre la nouvelle méthode et les résultats numériques obtenus dans [51] pour la méthode ghost-fluid et la méthode CSF pour les oscillations parasites, au temps $t = 1$.

Une comparaison avec la nouvelle méthode et une méthode de type Volume of Fluid, conservative, a également été faite. Pour une grille grossière, la nouvelle méthode est plus précise que la méthode Volume of Fluid. Par contre quand la grille est raffinée cette dernière est bien plus précise, ce qui est attendu étant donné que le traitement de l'interface est beaucoup plus sophistiqué. On en retient néanmoins qu'en cas d'écoulements peu résolus, la précision de notre méthode pour le traitement de la pression reste compétitive.

III.3.2.2 Elévation d'une bulle d'air dans de l'eau

On simule ici l'évolution de bulles d'air dans de l'eau, comme dans [95] pour la méthode Ghost Fluid. Les valeurs des paramètres physiques sont celles usuellement utilisées pour ce type de simulation, voir [22] pour plus de détails. On traite deux cas : une petite bulle, de rayon $1/300m$ et une plus grande, de rayon $1/3m$. Dans le premier cas, la tension de surface joue un rôle important dans l'évolution de l'interface, car l'interface a une courbure élevée. Dans le deuxième cas, la tension de surface a une influence moindre et de plus grandes déformations se produisent, ce qui permet de tester la stabilité de la méthode dans le cas de changements de topologie.

Nos résultats numériques sont en bon accord avec ceux obtenus dans [95]. Un test similaire a été réalisé pour comparer la nouvelle méthode à une méthode SPH dans [77], et une bonne adéquation pour la déformation de l'interface est également observée. Si on compare nos résultats à une méthode régularisée de type CSF, on observe que dans le cas de la petite bulle, on évite des oscillations parasites près de l'interface, comme constaté sur la Figure III.10. Dans le cas de la plus grande bulle, la méthode régularisée type CSF entraîne un plantage du code, dû à de trop fortes instabilités numériques.

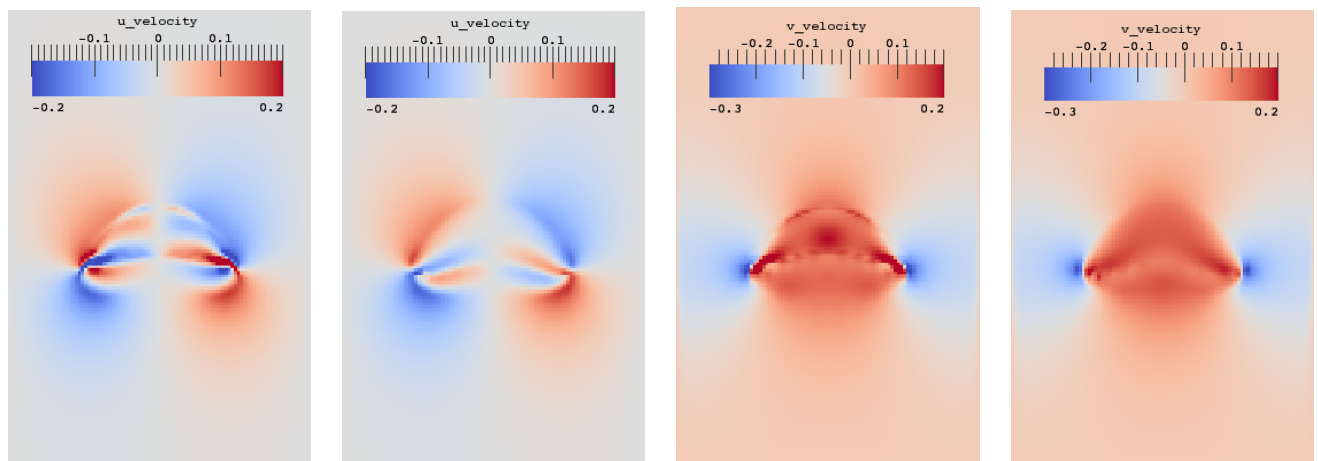


FIGURE III.10 – Petite bulle d'air dans de l'eau (III.3.2.2), vitesse horizontale et verticale, comparaison entre méthode régularisée type CSF (gauche) et la nouvelle méthode (droite)

III.3.2.3 Effondrement d'une colonne d'eau

Ce test simule l'évolution d'une colonne d'eau. La configuration initiale est une colonne d'eau au repos dans de l'air, de hauteur et de largeur 5.715 cm . Le domaine de calcul est de taille $40\text{ cm} \times 10\text{ cm}$, et les paramètres de l'eau et de l'air sont les mêmes que précédemment. Nos calculs sont réalisés avec 256×64 points.

La Figure III.11 présente l'évolution temporelle du front d'eau, comparé aux résultats expérimentaux de [126], aux résultats avec une résolution de la pression par une méthode Ghost-Fluid, et à la méthode conservative de Raessi et Pitsch [143]. La propagation du front est en bonne adéquation avec les résultats expérimentaux et ceux de la méthode conservative [143]. Cela signifie que, bien que la nouvelle méthode ne soit pas strictement conservative, l'erreur due au transfert de quantité de mouvement entre les fluides au travers de l'interface n'est pas suffisamment élevée pour ralentir la propagation du front. Ce n'est pas le cas si on résout la pression avec la méthode Ghost-Fluid, comme on peut le constater sur la Figure III.11 et dans [143].

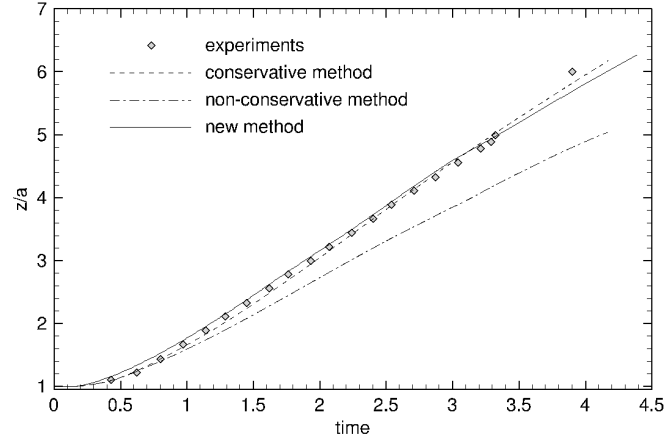


FIGURE III.11 – Evolution du front d'eau : comparaison entre les données expérimentales et plusieurs méthodes numériques : la méthode Ghost Fluid (non-conservative), la méthode conservative de Raessi et Pitsch et la nouvelle méthode, la position adimensionnée du front $\frac{z}{a}$ étant affichée comme fonction du time adimensionné $T = t\sqrt{g/H}$.

III.3.2.4 Influence d'un calcul précis de la level-set

On considère ici à nouveau une bulle d'air dans de l'eau, de rayon 0.025 m. Les paramètres physiques sont les mêmes que ceux utilisés précédemment. On compare la ré-initialisation classique de la level-set à la nouvelle méthode présentée dans la section II.5. Les résultats pour la composante horizontale de la vitesse sont présentés au même temps final sur la figure III.12. L'interface est matérialisée par une ligne blanche. La bulle d'air a fragmenté dans le premier cas, mais pas dans le deuxième. Il est connu théoriquement qu'en deux dimensions les effet de la tension de surface sont suffisamment forts pour prévenir la fragmentation d'une bulle. C'est donc le calcul effectué avec la nouvelle ré-initialisation qui est le plus proche de la réalité physique. La procédure de ré-initialisation classique, n'étant pas assez précise, ne permet pas de maintenir les filaments reliant les différentes parties de la bulle.

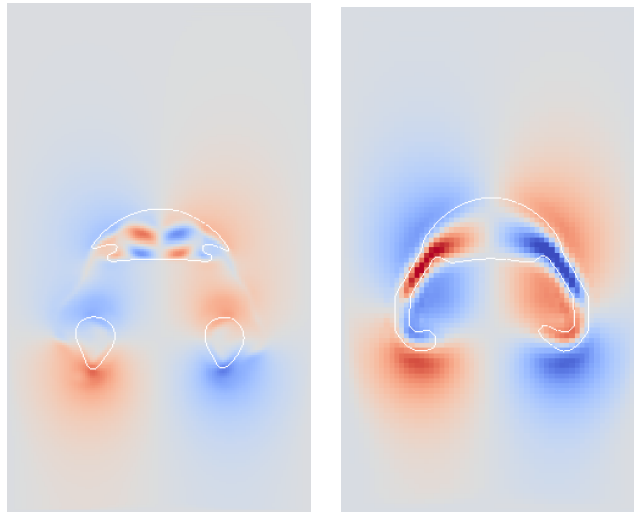


FIGURE III.12 – Comparaison ré-initialisation classique de la level-set et la nouvelle méthode, temps final de l'évolution d'une bulle d'air de rayon 0.025 m dans de l'eau.

Les tests numériques effectués en deux dimensions montrent donc que la méthode proposée permet d'améliorer significativement la précision et la stabilité de la résolution par rapport à la méthode Ghost-Fluid tout en gardant la simplicité de la formulation sur grille cartésienne, par rapport aux méthodes dites "cut-cell". Les perspectives de ce travail seraient tout d'abord d'incorporer la méthode dans la version 3D du code NaSCar, et d'effectuer davantage d'études numériques pour évaluer le comportement de la méthode dans le cas d'écoulements bifluïdes plus réalistes. Une piste intéressante

pour améliorer la précision de la méthode serait d'en produire une version incrémentale. Cela améliorerait la précision de l'étape de prédiction et faciliterait la prise en compte des conditions au bord lors du calcul de la pression, puisque ce ne serait plus qu'une correction d'amplitude faible qui serait calculée près des bords extérieurs du domaine de calcul.

III.4 Convergence de schémas numériques pour des problèmes elliptiques dans des domaines complexes

Dans cette partie, nous étudions la convergence de schémas numériques pour des problèmes elliptiques avec des frontières ou interfaces immergées, pour lesquels l'erreur de troncature n'est pas uniforme dans tout le domaine. Ces travaux ont été publiés dans [168] et soumis pour publication [167]. On suppose dans la suite de cette section que les solutions des problèmes elliptiques qu'on considère sont assez régulières pour les besoins des analyses présentées, sans insister sur les hypothèses nécessaires.

III.4.1 Fonctions de Green discrètes

Les raisonnements menés en une dimension pour la convergence du modèle statique d'électroporation, qui impliquent de manipuler les lignes de la matrice de discrétisation une à une, semblent difficiles ou au moins fastidieux à mener en deux dimensions, et ce d'autant plus que l'interface peut revêtir une forme arbitraire. Nous allons donc utiliser dans la suite une formulation qui considère la matrice de discrétisation de manière plus globale, par blocs correspondant à des discrétisations semblables plutôt que ligne par ligne. Cette formulation se base sur l'utilisation d'un principe du maximum discret et de fonctions de Green discrètes. On en présente ici le principe, en nous inspirant de l'article de Ciarlet [40], d'une manière légèrement reformulée pour être en accord avec la manière dont nous construisons les matrices de discrétisation.

On note A_h la matrice de discrétisation du problème elliptique considéré, on suppose qu'elle est monotone, et on considère par exemple pour simplifier une condition aux limites de Dirichlet homogène, qu'on applique sur l'ensemble de points discrets $\delta\Omega_h$ appartenant au bord du domaine. Pour chaque point Q du domaine discret Ω_h , on définit la fonction de Green discrète notée $G_h(\cdot, Q) = \left(G_h(P, Q) \right)_{P \in \Omega_h \cup \delta\Omega_h}$ comme la solution du problème discret :

$$\begin{cases} A_h G_h(\cdot, Q)(P) = \begin{cases} 0, & P \neq Q \\ 1, & P = Q \end{cases} & P \in \Omega_h, \\ G_h(P, Q) = 0, & P \in \delta\Omega_h. \end{cases} \quad (\text{III.4.1})$$

En fait, chaque fonction de Green discrète $G_h(\cdot, Q)$ représente une colonne de la matrice inverse de l'opérateur discret A_h . On peut obtenir des estimations sur les coefficients de la matrice inverse sommés par blocs de colonnes, avec le résultat suivant adapté de [40]

Lemma III.4.1. *Soit S un sous-ensemble de points de la grille, W une fonction discrète avec $W \equiv 0$ sur Γ_h , et $\alpha > 0$ tels que :*

$$\begin{cases} (A_h W)(P) \geq 0 & \forall P \in \Omega_h, \\ (A_h W)(P) \geq \alpha^{-i} & \text{pour tout } P \in S. \end{cases}$$

Alors

$$\sum_{Q \in S} G_h(P, Q) \leq \alpha^i W(P).$$

Ces estimations sur les fonctions de Green discrètes sommées par bloc peuvent être utilisées pour évaluer l'influence sur la convergence en norme L^∞ de différentes erreurs d'approximation dans différentes zones du domaine de calcul. Sur la figure III.13, on peut observer un exemple de fonction de Green discrète, pour un point situé à l'intérieur du domaine de calcul. L'amplitude de cette fonction est représentée pour différentes tailles de grilles.

Les fonctions de Greens discrètes ont été beaucoup utilisées dans le passé pour montrer des propriétés de convergence de méthodes de différences finies avec une discrétisation moins précise sur le bord du domaine qu'à l'intérieur, par exemple dans [30] [31] [26], ou pour obtenir des estimations ponctuelles de la convergence des dérivées discrètes de la solution numérique comme dans [33] ou [158], dans le cas de discrétisations uniformes à l'intérieur du domaine. Elles ont été également utilisées parfois pour étudier des méthodes d'éléments finis : [41], [60], [149] ou [163] par exemple et beaucoup plus rarement à notre connaissance dans le domaine des volumes finis, par exemple dans [59].

Pour analyser des schémas de type différences finies sur grilles cartésiennes, l'usage courant semble être d'utiliser des techniques inspirées des éléments finis ou des volumes finis, comme par exemple dans [67] ou [53] (même si dans

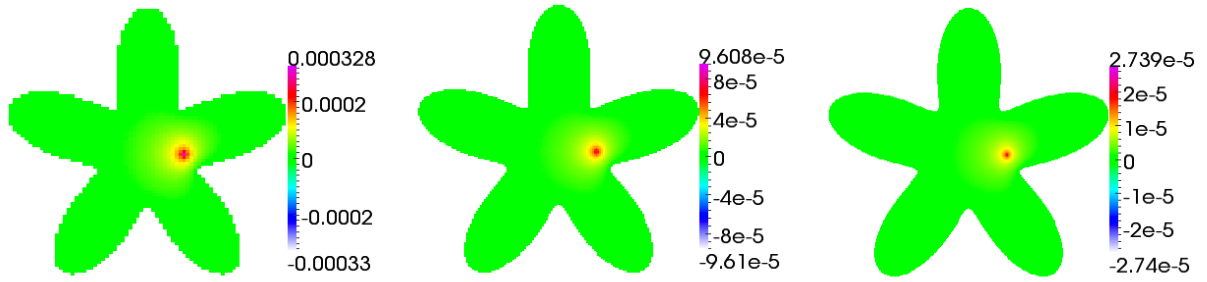


FIGURE III.13 – Exemples de fonction de Green discrète, 100^2 , 200^2 et 400^2 points.

cette référence la méthode n'est pas présentée comme une méthode de différences finies). Cependant on perd dans cette analyse le caractère explicite de la formulation en différences finies, puisqu'il faut re-formuler la méthode comme une classe particulière d'éléments finis ou de volumes finis. De plus, on obtient alors en général des résultats en norme H^1 , qui donnent de l'information sur la convergence globale de la solution et de son gradient, mais au détriment d'une information plus locale avec la norme L^∞ . Cette information en norme L^∞ est particulièrement pertinente dans le cas de méthodes de frontières immergées, puisque c'est près des interfaces ou des frontières que se concentre la problématique de la précision de la méthode. Par contre, les hypothèses de régularité sur la solution sont souvent plus fortes lors d'une analyse de méthodes de différences finies à cause du calcul de l'erreur de troncature qui fait typiquement intervenir les dérivées de la solution jusqu'à l'ordre quatre pour une méthode classique centrée d'ordre deux.

Dans le contexte des problèmes avec des frontières ou interfaces immergées, les études récentes de la convergence de méthodes de différences finies qui utilisent le formalisme des différences finies sont peu nombreuses : citons les travaux de Beale ([11] [9] [10]) et de Li ([116] et [112]) et leurs co-auteurs et ceux de Min [172].

III.4.2 Super-convergence du gradient pour la méthode de Shortley-Weller

Dans la suite, on considère un domaine Ω de forme complexe, appartenant à \mathbb{R}^2 ou \mathbb{R}^3 , avec une frontière extérieure Γ . La méthode de Shortley-Weller est une méthode de différences finies conçue pour résoudre l'équation de Poisson dans le domaine Ω avec des conditions aux limites de Dirichlet sur Γ :

$$\begin{cases} -\Delta u = f \text{ dans } \Omega, \\ u = g \text{ sur } \Gamma. \end{cases} \quad (\text{III.4.2})$$

Cette méthode est connue pour converger à l'ordre deux en norme L^∞ pour la solution et pour le gradient de celle-ci, bien que son erreur de troncature soit seulement d'ordre un sur le bord du domaine. Jusqu'à récemment, à notre connaissance, toutes les preuves de la super-convergence du gradient pour la méthode de Shortley-Weller, qu'elles utilisent le formalisme des différences finies comme dans [172], ou le formalisme des éléments finis comme dans [114] et [113], avaient été établies en norme L^2 . Nous avons amélioré ce résultat en présentant une preuve de cette propriété pour la norme L^∞ dans [168]. Une preuve utilisant une technique différente a été présentée dans [150], qui n'était pas encore parue quand nous avons soumis notre article.

Notre preuve repose sur l'étude d'une équation de Poisson formulée pour les dérivées discrètes, avec des conditions aux limites de Dirichlet précises à l'ordre deux. On utilise pour cela le fait que près du bord du domaine, l'erreur pour la solution numérique est d'ordre trois.

L'ensemble des points de grille situés dans le domaine Ω se note Ω_h . L'ensemble des points situés à l'intersection entre les axes de la grille et la frontière extérieure Γ se note Γ_h . Ces points sont utilisés pour imposer les conditions aux limites. On dit qu'un point de grille est régulier si aucun de ses voisins directs n'appartient à Γ_h , et qu'il est irrégulier dans le cas contraire. L'ensemble des points de grille réguliers se note Ω_h^{**} , et celui des points irréguliers Ω_h^* , voir Figure III.14.

En trois dimensions, on note les six points voisins d'un point de grille P avec les notations P_i , $1 \leq i \leq 6$ et leurs distances à P sont notées h_i , $1 \leq i \leq 6$. Si P est un point irrégulier alors au moins l'un des h_i est différent de h . La

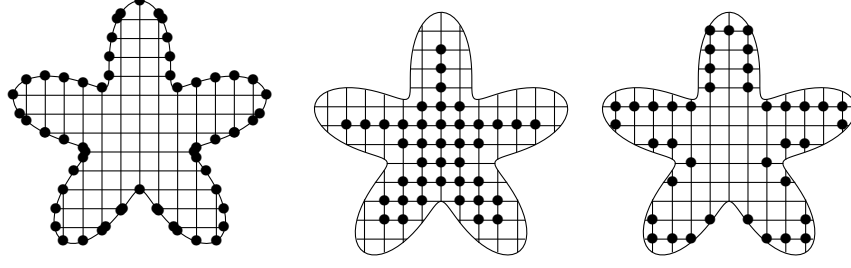


FIGURE III.14 – Méthode de Shortley-Weller : Γ_h = points sur la frontière extérieure, Ω_h^{**} = points de grille réguliers, Ω_h^* = points de grille irréguliers, $\Omega_h^{**} \cup \Omega_h^* = \Omega_h$

discrétisation de l'opérateur de Laplace avec la méthode de Shortley-Weller s'écrit :

$$\begin{aligned} -\Delta_h u_h(P) = & \left(\frac{2}{h_1 h_2} + \frac{2}{h_3 h_4} + \frac{2}{h_5 h_6} \right) u_h(P) - \frac{2}{h_1(h_1 + h_2)} u_h(P_1) \\ & - \frac{2}{h_2(h_1 + h_2)} u_h(P_2) - \frac{2}{h_3(h_3 + h_4)} u_h(P_3) - \frac{2}{h_4(h_3 + h_4)} u_h(P_4) \\ & - \frac{2}{h_5(h_5 + h_6)} u_h(P_5) - \frac{2}{h_6(h_5 + h_6)} u_h(P_6). \end{aligned}$$

Cette formule produit une erreur de troncature d'ordre deux pour les points réguliers, et d'ordre un pour les points irréguliers. La matrice associée à ce système linéaire a tous ses coefficients diagonaux strictement positifs, tous ses coefficients extra-diagonaux négatifs ou nuls, et est irréductible, à diagonale fortement dominante. C'est donc une matrice monotone, ce qui signifie que tous les coefficients de son inverse sont positifs.

III.4.2.1 Résultat de convergence

On note u_h la solution numérique du problème (III.4.2) obtenue avec la méthode de Shortley-Weller. On note $e_h(P) = u(P) - u_h(P)$ l'erreur locale sur un point P , et $\varphi(P)$ la distance entre un point P et le bord du domaine Γ . Le résultat suivant, présenté dans [127] et [172], nous est utile car il fournit des conditions aux limites pour un opérateur de Laplace discret appliqué aux dérivées discrètes de la solution numérique.

Proposition III.4.1. *L'erreur locale $e_h(P)$ sur un point P de la méthode de Shortley-Weller vérifie*

$$\begin{aligned} |e_h(P)| &\leq O(h^2) \quad \forall P \in \Omega_h, \\ |e_h(P)| &\leq O(h^2) \left(\varphi(P) + \min(h_i) \right), \quad \forall P \text{ tel que } \varphi(P) = O(h), \end{aligned}$$

avec h_i , $1 \leq i \leq 6$ définis comme ci-dessus.

On peut montrer ce résultat en utilisant les fonctions de Green discrètes, voir [169].

On définit S_h par :

$$S_h = \{P, P \text{ milieu de } [MN], M, N \in \Omega_h \cup \Gamma_h, M \text{ et } N \text{ adjacents dans la direction } x.\} \quad (\text{III.4.3})$$

On définit la dérivée discrète en x , $D_x u_h(P)$ sur chaque point P dans S_h par

$$D_x u_h(P) = \frac{u_h(M) - u_h(N)}{x_M - x_N}, \quad (\text{III.4.4})$$

où M et N sont les points appartenant à $\Omega_h \cup \Gamma_h$ tels que P est le milieu de $[MN]$.

On divise S_h en deux sous-ensembles de points :

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega}_h &= \{P \in S_h, \text{ tel que tous les voisins directs de } P \text{ dans } S_h \text{ sont à une distance } h \text{ de } P\}, \\ \tilde{\Gamma}_h &= S_h \setminus \tilde{\Omega}_h. \end{aligned}$$

Par construction, il est possible d'appliquer le schéma centré classique d'ordre deux pour l'équation de Poisson pour tous les points de $\tilde{\Omega}_h$, et tous les points de $\tilde{\Gamma}_h$ sont à une distance inférieure à $3h$ du bord du domaine.

Proposition III.4.2. *Pour la méthode de Shortley-Weller, l'erreur locale sur la dérivée discrète en x est d'ordre deux :*

$$|\partial_x u(P) - D_x u_h(P)| \leq O(h^2), \quad \forall P \in S_h.$$

La preuve du théorème est divisée en deux parties :

- on commence par montrer que le gradient discret est d'ordre deux pour tout point P appartenant à $\tilde{\Gamma}_h$. On sait grâce à la proposition III.4.1 que :

$$|e_h(Q)| \leq O(h^2) \left(\varphi(Q) + \min(h_i) \right), \quad \forall Q \in \Omega_h \text{ tel que } \varphi(Q) \leq 4h,$$

avec h_i , $1 \leq i \leq 6$, les distances entre le point Q et ses voisins directs dans chaque direction. Par ailleurs, tous les points impliqués dans la définition des dérivées en x discrètes sur les points appartenant à $\tilde{\Gamma}_h$ se trouvent à une distance du bord du domaine inférieure à $4h$. Avec quelques calculs, on peut en déduire que

$$|\partial_x u(P) - D_x u_h(P)| \leq O(h^2) \quad \forall P \in \tilde{\Gamma}_h.$$

- on étudie ensuite une équation de Laplace discrète formulée pour les dérivées discrètes en x . L'opérateur discret $-\Delta_h$ appliqué aux points appartenant à $\tilde{\Omega}_h$ est le schéma à sept points centré classique. Par conséquent, sur ce point, les opérateurs discrets $-\Delta_h$ et D_x commutent, et on peut écrire

$$D_x(-\Delta_h u_h)(P) = -\Delta_h(D_x u_h)(P), \quad \forall P \in \tilde{\Omega}_h.$$

Par conséquent, le vecteur $v_h = (D_x u_h(P))_{P \in S_h}$ vérifie le système linéaire

$$-\Delta_h v_h(P) = D_x f(P) \quad \forall P \in \tilde{\Omega}_h, \quad (\text{III.4.5})$$

$$v_h(P) = D_x u_h(P) \quad \forall P \in \tilde{\Gamma}_h, \quad (\text{III.4.6})$$

qui est une version discrète du Laplacien appliqué à la dérivée en x de la solution u de (III.4.2). On peut donc appliquer une analyse similaire à celle pour la convergence de la solution elle-même, et on montre que

$$|\partial_x u(P) - D_x u_h(P)| \leq O(h^2), \quad \forall P \in S_h, \quad (\text{III.4.7})$$

ce qui prouve que le gradient discret converge bien à l'ordre deux en norme L^∞ .

III.4.2.2 Etude numérique des fonctions de Green discrètes

On étudie ici numériquement l'amplitude en norme L^∞ des différentes sommes des fonctions de Green discrètes considérées avant. L'interface Σ est définie par :

$$\varphi(r, \theta) = r - r_0 - 0.2 \sin(\omega \theta).$$

avec $r = \sqrt{(x - x_c)^2 + (y - y_c)^2}$, $\theta = \arctan((y - y_c)/(x - x_c))$, $x_c = y_c = 0.2\sqrt{20}$. et $\omega = 5$, $r_0 = 0.5$.

Sur les Figures III.15 et III.16, on peut observer les sommes des fonctions de Green pour les points de grille réguliers et irréguliers $\sum_{Q \in \Omega_h^{**}} G_h(P, Q)$ et $\sum_{Q \in \Omega_h^*} G_h(P, Q)$. On observe un comportement en $O(1)$ pour $\sum_{Q \in \Omega_h^{**}} G_h(P, Q)$ et un comportement en $O(h)$ pour $\sum_{Q \in \Omega_h^*} G_h(P, Q)$, ce qui est en accord avec les estimations qu'on obtient dans la preuve de la proposition III.4.1 pour ces ensembles de points.

III.4.3 Etude de la convergence d'une méthode pour des problèmes elliptiques avec des interfaces

Nous avons ensuite étudié la convergence de la méthode présentée dans la section III.1 pour résoudre

$$-\nabla \cdot (k \nabla u) = f \text{ dans } \Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \quad (\text{III.4.8})$$

$$[[u]] = \alpha \text{ sur } \Sigma \quad (\text{III.4.9})$$

$$[[k \frac{\partial u}{\partial n}]] = \beta \text{ sur } \Sigma \quad (\text{III.4.10})$$

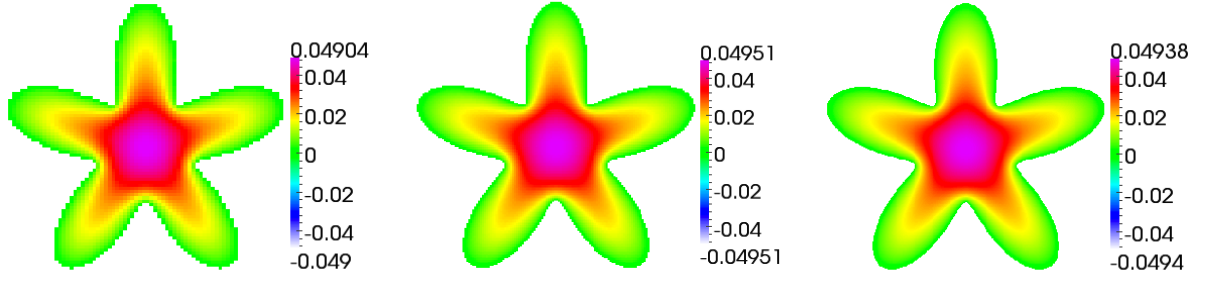


FIGURE III.15 – Somme des fonctions de Green discrètes pour les points de grilles régulières, 100^2 , 200^2 et 400^2 points.

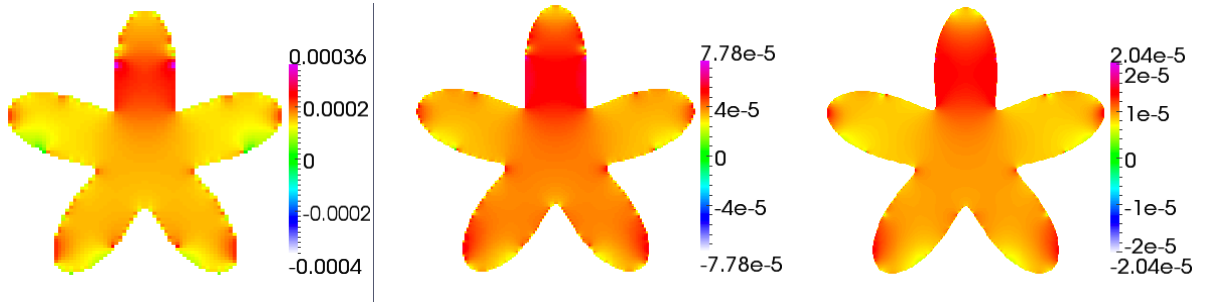


FIGURE III.16 – Somme des fonctions de Green discrètes pour les points de grilles irréguliers, 100^2 , 200^2 et 400^2 points.

avec k constant dans chaque sous-domaine Ω_1 et Ω_2 , et des conditions aux limites de type Dirichlet sur $\delta\Omega$, et $[\![\cdot]\!] = \cdot_1 - \cdot_2$. On suppose par convention que le coefficient k est plus grand dans Ω_2 que dans Ω_1 ($k_2 > k_1$), et que le vecteur \mathbf{n} est la normale sortante pour le sous-domaine Ω_2 . Nous avons montré la convergence en norme L^∞ de la méthode dans deux cas : la méthode originale d'ordre deux en une dimension, et la version d'ordre un en deux dimensions. Cette version d'ordre un est construite selon le même principe que la méthode originale d'ordre deux, mais la discrétisation des dérivées normales au travers de l'interface a seulement une erreur de troncature d'ordre un.

La preuve repose sur la monotonie de la matrice de discrétisation, et l'utilisation d'un principe du maximum discret. Dans le cas de la méthode avec une discrétisation à l'ordre deux, la matrice de discrétisation n'est pas à diagonale dominante, comme c'est souvent le cas pour des discrétisation classiques de problèmes elliptiques, à cause des lignes représentant à la discrétisation des conditions de saut sur les flux. On ne peut donc pas montrer la monotonie de la matrice avec cet argument classique. Une fois que la monotonie de la matrice est prouvée, on obtient des relations linéaires entre les sommes des coefficients de différents blocs de la matrice inverse, et on combine ces relations pour obtenir les estimations voulues. On obtient ainsi des estimations sur les coefficients de la matrice inverse, bloc par bloc, permettant de prendre en compte les différents types d'erreurs de troncature dans les différentes zones du domaines.

III.4.3.1 Description de la méthode d'ordre un

On utilise les mêmes notations pour les points que dans la section III.1. On définit également le sous-ensemble Ω_h^δ comme l'ensemble des points réguliers pour lesquels le stencil de l'opérateur elliptique discret traverse les isolignes de la level-set $\varphi = \delta$ ou $\varphi = -\delta$, avec δ tel que $0 < \delta < r_0$. Notamment, la fonction φ est C^2 sur Ω_h^δ avec des dérivées bornées.

La version d'ordre un est similaire à la méthode d'ordre deux décrite dans la section III.1, excepté pour la discrétisation des flux sur l'interface, que nous présentons ici. On discrétise les conditions de saut (III.1.2) et (III.1.3) sur chaque point

d'interface $I_{i+1/2,j}$ par

$$u_{i+1/2,j}^{2,h} - u_{i+1/2,j}^{1,h} = \alpha(I_{i+1/2,j}), \quad (\text{III.4.11})$$

$$k_2(\partial_n u^2)_{i+1/2,j}^h - k_1(\partial_n u^1)_{i+1/2,j}^h = \beta(I_{i+1/2,j}), \quad (\text{III.4.12})$$

et de manière similaire pour chaque point d'interface $I_{i,j+1/2}$. On remplace les variables $u_{i+1/2,j}^{2,h}$ et $u_{i,j+1/2}^{2,h}$ par $u_{i+1/2,j}^{1,h} + \alpha(I_{i+1/2,j})$ et $u_{i,j+1/2}^{1,h} + \alpha(I_{i,j+1/2})$ dans les équations pour l'opérateur elliptique ou pour les flux, afin d'éliminer la condition de saut (III.4.11) du système linéaire. Cela ne change pas l'erreur de troncature pour ces équations.

La discrétisation des dérivées normales dépend de la géométrie locale de l'interface. Sur la figure III.17 on peut observer les quatre cas rencontrés en pratique si h est suffisamment petit. La première intersection entre la normale à l'interface et la grille est située sur un segment : soit $[M_{i,j}, M_{i,j-1}]$, soit $[M_{i,j-1}, M_{i+1,j-1}]$, soit $[M_{i,j}, M_{i,j+1}]$, soit $[M_{i,j+1}, M_{i+1,j+1}]$. La dérivée normale discrète est calculée comme la dérivée dans la direction de la normale de l'interpolant linéaire de la solution numérique dans le triangle composé du point d'interface $I_{i+1/2,j}$ et du segment mentionné juste avant. Si on note K ce triangle, (x_1, y_1) , (x_2, y_2) et (x_3, y_3) ses sommets, et u_1 , u_2 et u_3 les valeurs qui y sont associées, les fonctions de base sur les sommets pour l'interpolation linéaire sont

$$\lambda_j(x, y) = \alpha_j x + \beta_j y + \gamma_j, \quad j = 1, 2, 3,$$

avec

$$\begin{aligned} \alpha_j &= \frac{y_k - y_i}{(x_j - x_k)(y_j - y_i) - (x_j - x_i)(y_i - y_k)}, \\ \beta_j &= \frac{x_i - x_k}{(x_j - x_k)(y_j - y_i) - (x_j - x_i)(y_i - y_k)}, \\ \gamma_j &= \frac{x_k y_i - x_i y_k}{(x_j - x_k)(y_j - y_i) - (x_j - x_i)(y_i - y_k)}, \end{aligned}$$

(n_x, n_y) étant une approximation de la normale sur le point d'interface. Avec ces notations, l'approximation de la dérivée normale s'écrit par exemple pour le point d'interface $I_{i+1/2,j}$

$$(\partial_n u)_{i+1/2,j}^h = (u_1 \alpha_1 + u_2 \alpha_2 + u_3 \alpha_3) n_x + (u_1 \beta_1 + u_2 \beta_2 + u_3 \beta_3) n_y.$$

Cette discrétisation est seulement d'ordre un car elle repose sur une interpolation linéaire. Dans la suite, on note A_h la matrice du système linéaire à résoudre, en une ou deux dimensions d'espace.

III.4.3.2 Monotonie de la matrice A_h

Soit v un vecteur tel que tous les coefficients de $A_h v$ sont positifs ou nuls, ce qu'on note $A_h v \geq 0$. On montre que tous les coefficients de v sont également positifs ou nuls, ce qui signifiera que tous les coefficients de A_h^{-1} sont positifs ou nuls.

On considère le minimum de v . Ce minimum est situé soit sur un point de grille dans l'un des deux sous-domaines Ω_1 ou Ω_2 , soit sur un point d'interface.

- Si le minimum est localisé sur un point de grille, alors cela entraîne que le minimum est aussi atteint sur les voisins directs du point de grille. Tous les coefficients de v appartenant au même sous-domaine sont donc égaux. Si le sous-domaine concerné touche le bord extérieur du domaine, en utilisant une ligne de $A_h v$ correspondant à un point de grille sur le bord du domaine, on déduit directement que tous les coefficients de v sont positifs. Dans le cas contraire, on déduit que le minimum est aussi atteint sur un point d'interface.
- Si le minimum est atteint sur un point d'interface, on remarque qu'avec la convention utilisée pour la normale à l'interface, illustrée sur la Figure III.4.3.1, alors la dérivée normale discrète sur ce point est positive dans Ω_1 et négative dans Ω_2 . En utilisant l'inégalité de $A_h v$ correspondant à la discrétisation des flux sur ce point, on montre que la dérivée normale discrète est nulle de chaque côté de l'interface. De plus, si la dérivée normale discrète est nulle, alors les valeurs de v sur les trois points impliqués dans le stencil sont égales entre elles et on revient au cas où le minimum est sur un point de grille.

Tous les coefficients de v sont donc positifs, A_h est inversible et tous les coefficients de A_h^{-1} sont non-négatifs.

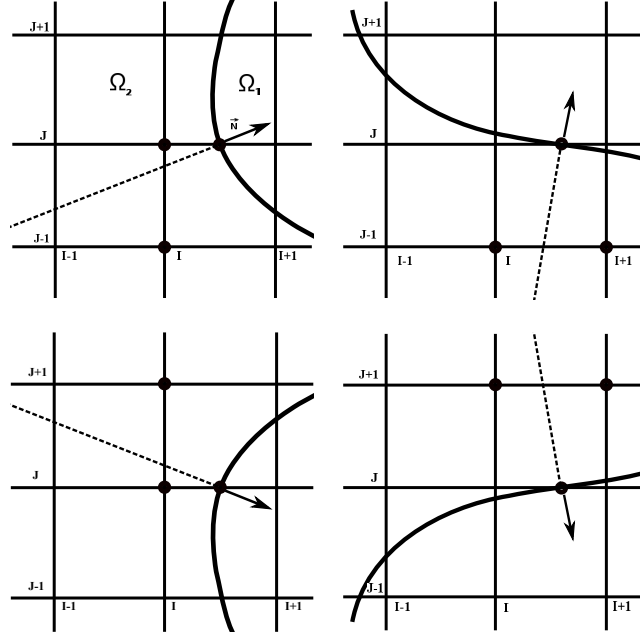


FIGURE III.17 – Suivant l'orientation de la normale, toutes les discrétisation possibles pour le flux du côté gauche de l'interface, avec les points impliqués dans le stencil en indiqués par des cercles noirs.

III.4.3.3 Preuve de convergence à l'ordre un en deux dimensions

Nous considérons un problème avec une interface, autour de laquelle la discrétisation est moins précise que dans le reste du domaine. Nous avons donc besoin d'obtenir une estimation de la somme des coefficients de la matrice inverse pour les points compris dans cette zone, c'est-à-dire Σ_h et Ω_h^* en utilisant les notations de la section III.1. Il faut donc utiliser une fonction discrète W qui tienne compte de la présence de cette interface, ce qui se fait aisément au moyen d'une fonction level-set. Cependant, la fonction level-set n'est pas C^2 dans tout le domaine, donc quand on lui applique un opérateur elliptique discret, on risque d'obtenir des termes non-bornés, et pas forcément positifs. Il n'est donc pas immédiat de trouver une fonction W qui vérifie toutes les hypothèses du résultat présenté dans la section précédente sur les fonctions de Green discrètes. Le résultat suivant, qui en est une extension, nous est donc utile pour tenir compte du fait que des termes négatifs peuvent apparaître quand on applique l'opérateur elliptique discrétisé à la fonction discrète choisie :

Proposition III.4.3. Soient S et \tilde{S} deux sous-ensembles de points, W une fonction discrète avec $W \equiv 0$ sur $\delta\Omega_h$, et $\alpha > 0$, $\beta > 0$ tels que :

$$\begin{cases} (A_h W)(P) \geq 0, & \forall P \in \Omega_h \cup \Sigma_h \setminus \tilde{S}, \\ (A_h W)(P) \geq \alpha^{-i}, & \forall P \in S, \\ (A_h W)(P) \geq -(\beta^{-j}), & \forall P \in \tilde{S}. \end{cases}$$

Alors

$$\sum_{Q \in S} G_h(P, Q) \leq \alpha^i W(P) + \alpha^i \beta^{-j} \sum_{Q \in \tilde{S}} G_h(P, Q), \quad \forall P \in \Omega_h \cup \Sigma_h.$$

Preuve D'après la définition des fonctions de Green discrètes, on peut écrire

$$A_h W(P) \geq A_h \left(\alpha^{-i} \sum_{Q \in S} G_h(\cdot, Q) - \beta^{-j} \sum_{Q \in \tilde{S}} G_h(\cdot, Q) \right)(P), \quad \forall P \in \Omega_h \cup \Sigma_h.$$

Comme tous les coefficients de l'inverse de A_h sont non-négatifs, on en déduit que

$$W(P) - \alpha^{-i} \sum_{Q \in S} G_h(P, Q) + \beta^{-j} \sum_{Q \in \tilde{S}} G_h(P, Q) \geq 0, \quad \forall P \in \Omega_h \cup \Sigma_h,$$

□

Le but dans la suite est de trouver des fonctions W qui vérifient dans la plupart du domaine $(A_h W)(P) \geq 0$ ou $(A_h W)(P) \geq \alpha^{-i}$ et éventuellement, sur une zone pas trop grande $(A_h W)(P) \geq -(\beta^{-j})$ avec (β^{-j}) pas trop fort en comparaison des α^{-i} .

Par exemple, on commence par construire une fonction F telle que W le vecteur des valeurs de F sur la grille et les points d'interface, avec $W \equiv 0$ sur $\delta\Omega_h$ vérifie

$$\begin{aligned} -\left(\nabla \cdot (k \nabla F)\right)_{i,j}^h &\geq -C_1, \quad \forall M_{i,j} \in \Omega_h, \\ k_2(\partial_n F^2)_{i+1/2,j}^h - k_1(\partial_n F^1)_{i+1/2,j}^h C_2 &> 0. \end{aligned}$$

et on peut donc en déduire que

$$\sum_{Q \in \Sigma_h} G_h(:, Q) \leq \frac{W}{C_2} + \frac{C_1}{C_2} \sum_{Q \in \Omega_h} G_h(:, Q). \quad (\text{III.4.13})$$

Puis on construit une autre fonction discrète \bar{W} telle que

$$\begin{aligned} -\left(\nabla \cdot (k \nabla \bar{W})\right)_{i,j}^h &\geq \frac{1}{2}, \quad \forall M_{i,j} \in \Omega_h, \\ k_2(\partial_n \bar{W}^2)_{i+1/2,j}^h - k_1(\partial_n \bar{W}^1)_{i+1/2,j}^h &= O(h), \quad \forall I_{i+1/2,j} \in \Sigma_h, \\ k_2(\partial_n \bar{W}^2)_{i,j+1/2}^h - k_1(\partial_n \bar{W}^1)_{i,j+1/2}^h &= O(h), \quad \forall I_{i,j+1/2} \in \Sigma_h. \end{aligned}$$

Il existe donc deux constantes strictement positives, C_3 et C_4 qui dépendent uniquement de f, g, k et Ω , telles que

$$\sum_{Q \in \Omega_h} G_h(:, Q) \leq \frac{\bar{W}}{C_3} + \frac{C_4}{C_3} h \sum_{Q \in \Sigma_h} G_h(:, Q). \quad (\text{III.4.14})$$

En combinant (III.4.13) et (III.4.14) on obtient pour h suffisamment petit :

$$\sum_{Q \in \Sigma_h} G_h(:, Q) \leq O(1), \quad (\text{III.4.15})$$

$$\sum_{Q \in \Omega_h} G_h(:, Q) \leq O(1). \quad (\text{III.4.16})$$

De manière similaire, on construit des fonctions discrètes \tilde{W}_P , avec P un point de Ω_h^δ , telles qu'il existe des constantes strictement positives C_6 et C_7 telles que

$$\begin{aligned} (A_h \tilde{W}_P)(Q) &\geq 0, \quad \forall Q \in \Omega_h \setminus \Omega_h^*, \\ (A_h \tilde{W}_P)(P) &\geq \frac{C_5}{h^2}, \\ (A_h \tilde{W}_P)(Q) &\geq -C_6 \quad \forall Q \in \Omega_h^*, \\ (A_h \tilde{W}_P)(Q) &\geq -C_7 \quad \forall Q \in \Sigma_h, \end{aligned}$$

pour obtenir

$$G_h(:, P) \leq \frac{h^2}{C_5} \tilde{W}_P(P) + h^2 \frac{C_7}{C_5} \sum_{Q \in \Sigma_h} G_h(:, Q) + h^2 \frac{C_6}{C_5} \sum_{Q \in \Omega_h^*} G_h(:, Q). \quad (\text{III.4.17})$$

On somme cette relation sur tous les points P appartenant à Ω_h^δ , et on utilise l'estimation (III.4.16) pour Σ_h , pour obtenir

$$\sum_{P \in \Omega_h^\delta} G_h(:, P) \leq O(h) + O(h) \sum_{Q \in \Omega_h^*} G_h(:, Q). \quad (\text{III.4.18})$$

Enfin, on construit une dernière fonction discrète \check{W} , qui vérifie

$$\begin{aligned} (A_h \check{W}_P)(Q) &\geq 0, \quad \forall Q \in \Omega_h \setminus \Omega_h^\delta, \\ (A_h \check{W}_P)(Q) &\geq -\frac{C_8}{h}, \quad \forall Q \in \Omega_h^\delta, \\ (A_h \check{W}_P)(Q) &\geq \frac{C_9}{h} \quad \forall Q \in \Omega_h^*, \\ (A_h \check{W}_P)(Q) &\geq 0 \quad \forall Q \in \Sigma_h, \end{aligned}$$

et nous en concluons que

$$\sum_{Q \in \Omega_h^*} G_h(:, Q) \leq \frac{C_8}{C_9} \sum_{Q \in \Omega_h^\delta} G_h(:, Q) + \frac{h}{C_9} \check{W}(:). \quad (\text{III.4.19})$$

En combinant (III.4.18) et (III.4.19) on obtient pour h suffisamment petit

$$\sum_{Q \in \Omega_h^*} G_h(:, Q) \leq O(h). \quad (\text{III.4.20})$$

III.4.3.4 Résultat de convergence

Finalement, en utilisant les estimations III.4.15, III.4.16 et III.4.20, on obtient une estimation de l'erreur locale d'ordre un en norme L^∞ pour chaque point P appartenant à $\Omega_h \cup \Sigma_h$, en notant \bar{u} la solution exacte :

$$\begin{aligned} |\bar{u}(P) - u_h(P)| &= \left| \sum_{Q \in \Omega_h \cup \Sigma_h} G_h(P, Q) \tau(Q) \right|, \\ &\leq \left| \sum_{Q \in \Omega_h^*} G_h(P, Q) \tau(Q) \right| + \left| \sum_{Q \in \Omega_h \setminus \Omega_h^*} G_h(P, Q) \tau(Q) \right| + \left| \sum_{Q \in \Sigma_h} G_h(P, Q) \tau(Q) \right|, \\ &\leq O(h) \left| \sum_{Q \in \Omega_h^*} G_h(P, Q) \right| + O(h^2) \left| \sum_{Q \in \Omega_h \setminus \Omega_h^*} G_h(P, Q) \right| + O(h) \left| \sum_{Q \in \Sigma_h} G_h(P, Q) \right|, \\ &\leq O(h). \end{aligned}$$

III.4.3.5 Etude numérique des fonctions de Green discrètes

On étudie ici numériquement l'amplitude en norme L^∞ des différentes sommes des fonctions de Green discrètes considérées avant. Soit Σ une interface prenant la forme d'une ellipse, définie par :

$$\left(\frac{x}{18/27}\right)^2 + \left(\frac{y}{10/27}\right)^2 = 1.$$

L'ensemble des points Ω_h^δ est défini ici comme l'ensemble des points dont le stencil croise l'interface définie par

$$\left(\frac{x}{22.5/27}\right)^2 + \left(\frac{y}{12.5/27}\right)^2 = 1.$$

L'amplitude en norme L^∞ de ces sommes est présentée dans le tableau III.4. On observe le même comportement que pour les estimations (III.4.15), (III.4.16) et (III.4.20), à savoir un comportement en $O(1)$ pour $\sum_{Q \in \Sigma_h} G_h(P, Q)$ et $\sum_{Q \in \Omega_h} G_h(P, Q)$,

et un comportement en $O(h)$ pour $\sum_{Q \in \Omega_h^*} G_h(P, Q)$ et $\sum_{Q \in \Omega_h^\delta} G_h(P, Q)$.

N	Σ_h	Ω_h	Ω_h^*	Ω_h^δ
50	1.803×10^{-1}	2.985×10^{-1}	3.374×10^{-2}	2.971×10^{-2}
100	1.817×10^{-1}	2.965×10^{-1}	1.5642×10^{-2}	1.509×10^{-2}
200	1.818×10^{-1}	2.957×10^{-1}	8.371×10^{-3}	7.481×10^{-3}
400	1.820×10^{-1}	2.952×10^{-1}	4.164×10^{-3}	3.740×10^{-3}

TABLE III.4 – Etude numérique des fonctions de Green discrètes : chaque colonne donne la valeur de la somme des fonctions de Green discrètes pour les ensembles de points Σ_h , Ω_h , Ω_h^* et Ω_h^δ .

III.4.3.6 Preuve de convergence à l'ordre deux dans le cas 1D

Pour montrer la convergence de la méthode en une dimension, il faut commencer par étudier la monotonie de la matrice de discrétisation. Le principe est similaire à celui suivi en deux dimensions. On doit notamment montrer que si le minimum est atteint sur un point d'interface, alors avec la convention utilisée pour la normale à l'interface, la dérivée

normale discrète sur ce point est positive dans Ω_1 et négative dans Ω_2 . La discrétisation de la dérivée à l'interface étant calculée avec une formule d'ordre deux, si on considère juste la formule des flux en tant que telle, on n'arrive pas à en déduire le signe de la dérivée normale. Il faut utiliser en plus le fait que comme le vecteur v vérifie $A_h v \geq 0$, la discrétisation de l'opérateur elliptique sur les points de grilles voisins du point d'interface est positive, ce qui fournit une relation supplémentaire entre les points qui interviennent dans la formule de la dérivée normale. En tenant compte de cette relation, on arrive à montrer que la dérivée normale a bien le signe escompté de chaque côté de l'interface.

Ensuite, les estimations III.4.15, III.4.16 et III.4.20 étant valables aussi en une dimension, le résultat de convergence devient

$$\begin{aligned} |\bar{u}(P) - u_h(P)| &\leq \left| \sum_{Q \in \Omega_h^*} G_h(P, Q) \tau(Q) \right| + \left| \sum_{Q \in \Omega_h \setminus \Omega_h^*} G_h(P, Q) \tau(Q) \right| + \left| \sum_{Q \in \Sigma_h} G_h(P, Q) \tau(Q) \right|, \\ &\leq O(h) \left| \sum_{Q \in \Omega_h^*} G_h(P, Q) \right| + O(h^2) \left| \sum_{Q \in \Omega_h \setminus \Omega_h^*} G_h(P, Q) \right| + O(h) \left| \sum_{Q \in \Sigma_h} G_h(P, Q) \right|, \\ &\leq O(h^2). \end{aligned}$$

III.4.3.7 Discussion

Dans la littérature, peu de travaux portent sur l'étude de la convergence à l'ordre deux de méthodes sur grilles cartésiennes pour des problèmes avec des interfaces. Dans le cas d'une dimension, [86] et [171] utilisent des analyses détaillées des coefficients de la matrice inverse. En deux dimensions, Beale et Layton prouvent dans [11] la convergence à l'ordre deux dans le cas de coefficients de diffusion constants par morceaux. Ils utilisent le fait qu'une fonction discrète située près de l'interface peut être écrite comme la divergence d'une autre fonction plus petite en norme. Li et Ito prouvent dans [116] la convergence à l'ordre deux de la méthode MIIM, avec un principe du maximum discret. La preuve utilise une hypothèse technique sur la localisation de l'interface par rapport au point de grille, qui n'est pas toujours vérifiée en pratique. Très récemment Li *et al.* [112] prouvent la convergence à l'ordre deux de la solution et de son gradient dans le cas d'une méthode augmentée où le saut de la dérivée normale est considéré comme une inconnue supplémentaire. Le problème à résoudre est ré-écrit comme une nouvelle EDP composée d'un Laplacien et de dérivées d'ordre moins élevé près de l'interface, et le résultat de [11] est utilisé pour montrer la convergence.

Le résultat obtenu dans le cadre du travail présenté ici peut être considéré comme un premier pas vers la convergence de la méthode originale pour des interfaces à l'ordre deux de la section III.1. Le point limitant est la difficulté à prouver la monotonie de la matrice. En effet, le raisonnement évoqué dans la sous-section III.4.3.6 consistant à utiliser la discrétisation de l'opérateur elliptique sur les points de grilles voisins du point d'interface est réalisable sans trop de complexité en une dimension. Par contre, en deux dimensions davantage de points sont impliqués dans la discrétisation, et les calculs deviennent complexes. On arrive à montrer que la matrice est monotone en supposant que la normale à l'interface est assez proche de la normale à la cellule de la grille cartésienne. Pour se débarrasser de cette hypothèse qui est restrictive, une solution serait sans doute d'utiliser un stencil différent, tenant davantage compte de l'orientation de la normale à l'interface.

Les pistes pour obtenir le résultat de convergence en deux dimensions sont donc de

- prouver que la matrice de discrétisation pour la méthode d'ordre deux est bien monotone, quitte à modifier le stencil pour mieux prendre en compte l'orientation de la normale,
- utiliser la technique présentée dans [32], où on montre que des formules de différences finies produisant des matrices non-monotones satisfont tout de même un principe du maximum local et généralisé, qui permet d'obtenir un résultat de convergence,
- utiliser une technique semblable à celle de [112], en reformulant le problème sous une forme plus facile à traiter.

La technique que nous employons pour obtenir les estimations des coefficients de la matrice inverse pourrait aussi être utilisée pour prouver la convergence d'autres méthodes numériques pour des problèmes elliptiques où une interface de forme arbitraire intervient.

III.5 Modélisation et simulation de matériaux électrostrictifs

III.5.1 Contexte et modélisation

Ce projet a été mené en collaboration avec Angelo Iollo de l'IMB, Annie Colin, Philippe Poulin et Alan Luna du CRPP et du LOF (deux laboratoires bordelais de physico-chimie), et Marco Cisternino qui était alors en détachement de son poste d'ingénieur à Optimad Engineering. Optimad Engineering est une spinoff du Politecnico de Turin qui entretient

de nombreuses collaborations avec l'équipe INRIA Memphis à Bordeaux. Le travail présenté ici n'a pas été publié, en partie de part les contraintes de calendrier du partenaire industriel. J'ai choisi de le présenter tout de même car il apporte une ouverture sur l'utilisation d'octrees pour raffiner localement la grille cartésienne. Dans un cas où il faut tenir compte d'échelles très différentes entre les différentes grandeurs caractéristiques du problème, utiliser des éléments de discrétisation de taille variable permet d'en réduire le nombre tout en maintenant une précision suffisante dans les zones d'intérêt.

Les physiciens-chimistes expérimentateurs de ce projet développent des matériaux électrostrictifs : des matériaux dont la constante diélectrique varie avec la déformation mécanique, ce qui peut leur permettre de générer un courant électrique. Dans le cas des recherches menées au CRPP et au LOF, ces matériaux électrostrictifs sont constitués d'une matrice polymère (isolante) dans laquelle sont insérés des nanotubes de carbone (conducteurs). Ces nanotubes sont distribués sous forme d'un réseau, réalisé lors de la fabrication du matériau en utilisant des émulsions contenant des gouttes portant les nanotubes à leur surface, comme illustré sur la figure III.18. La taille et la forme de ces gouttes peuvent être ajustées pour maximiser les propriétés électriques du matériau et obtenir la meilleure réponse électrostrictive.

La simulation numérique offre une possibilité de pré-tester différentes configurations de ces réseaux de nanotubes, dans le but d'optimiser la réponse électrostrictive. Nous avons choisi de modéliser en première approche ce problème physique par un modèle stationnaire, en considérant les nanotubes comme des dipôles (voir la Figure III.18), et en résolvant une équation de Gauss pour le potentiel électrique :

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla v) = \frac{1}{\epsilon_0} \sum_i q_i \delta(\vec{x} - \vec{x}_i) \text{ dans } \Omega, \quad (\text{III.5.1})$$

$$v = g \text{ sur } \partial\Omega_D, \quad (\text{III.5.2})$$

$$\frac{\partial v}{\partial n} = 0 \text{ sur } \partial\Omega_N, \quad (\text{III.5.3})$$

avec q_i l'intensité de la charge pour le dipôle i , \vec{x}_i sa position et δ la fonction de Dirac, et des conditions aux limites de type Dirichlet ou symétriques suivant les bords du domaine, afin de représenter le milieu d'étude expérimental du matériau électrostrictif. Le potentiel électrique induit par une charge est respectivement dans $\frac{1}{2\pi\epsilon\epsilon_0} \log(\vec{r} - \vec{r}_i)$ dans \mathbb{R}^2 et $\frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{1}{\vec{r} - \vec{r}_i}$ dans \mathbb{R}^3 . On peut donc ré-écrire le problème, avec les notations de la figure III.18, comme :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\epsilon \nabla v_p) &= 0 \text{ dans } \Omega, \\ v_p &= g - v_n \text{ sur } \partial\Omega_D, \\ \frac{\partial v_p}{\partial n} &= -\frac{\partial v_n}{\partial n} \text{ sur } \partial\Omega_N, \\ \vec{r}_i \cdot \nabla(v_p + v_n) &= 0 \text{ sur } c_i, \\ v_n &= \frac{1}{\epsilon_0 \epsilon} \sum_i (q_i \log(\vec{r} - \vec{r}_{i+}) - q_i \log(\vec{r} - \vec{r}_{i-})), \end{aligned}$$

\vec{r}_{i+} et \vec{r}_{i-} représentant les positions des charges positive et négative des dipôles.

III.5.2 Schéma numérique sur octrees

La modélisation numérique d'une telle structure, constituée de différentes échelles, des inclusions de nanotubes à la matrice polymère en passant par la taille des gouttes de l'émulsion, nécessite des outils adaptés car de petites variations de l'inhomogénéité microscopique du milieu provoquent des variations sensibles du comportement électrique macroscopique. Pour tenir compte des différences d'échelle et concentrer les efforts de discrétisation autour des inclusions, nous avons choisi d'utiliser une discrétisation sur octrees à l'aide de la librairie parallèle PABLO, qui était alors en cours de développement à Optimad Engineering. En retour, la résolution numérique de ce problème fournissait un cas d'étude concret aux chercheurs d'Optimad pour développer et tester leur logiciel. PABLO est une bibliothèque C++/MPI permettant de gérer dynamiquement des quadrees ou octrees dans un contexte de calcul parallèle, développée dans le cadre de la licence GNU "Lesser General Public License".

Dans la littérature, Colella et Johansen [93] ont proposé un schéma centré sur les cellules avec des reconstructions quadratiques, qui s'applique à des grilles cartésiennes raffinées par blocs et est d'ordre deux. En ce qui concerne les octrees, Popinet [141] a développé un schéma centré utilisant tous les voisins directs afin d'obtenir une précision d'ordre deux. Losasso, Fedkiw and Gibou [121] ont développé un schéma qui n'est pas forcément consistant à l'interface entre

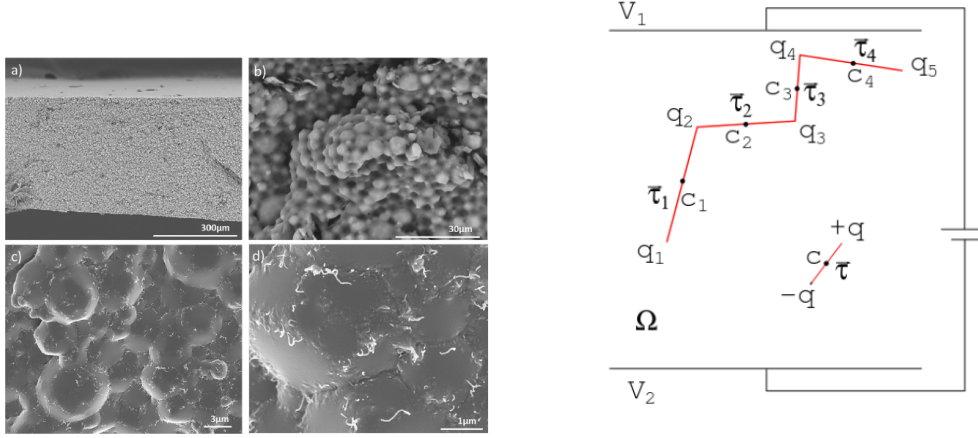


FIGURE III.18 – Gauche : matériau électrostrictif à différentes échelles (image fournie par A. Colin, A. Luna et P. Poulin), droite : modélisation des nanotubes de carbone par des dipôles.

deux niveaux de raffinement mais qui converge à l'ordre un quand on raffine la grille et qui produit une matrice symétrique, ce qui facilite la résolution par une méthode itérative du système linéaire associé. Gibou, Min et Cenicerros [43] ont proposé un schéma d'ordre deux pour la solution et son gradient en utilisant une discrétisation sur les sommets des cellules plutôt que sur leurs centres. Le stencil obtenu utilise uniquement les noeuds des cellules adjacentes. Un schéma sur quadrees de type Volumes Finis, pour lequel une convergence à l'ordre un est prouvée, a été étudié dans [53]. Dans [5] est étudié un schéma Volumes Finis de type DDFV pouvant s'appliquer à des discrétisations de type quadtree. Une preuve de convergence est établie pour la solution et son gradient. Une extension en dimension trois a été réalisée dans [52].

Le schéma numérique qui a été développé ici pour une structure d'octree est de type volumes finis. La construction des flux est le résultat d'un compromis entre précision et caractère local de la discrétisation, afin de limiter les échanges de données entre processeurs. Ce choix a été effectué en tenant compte de la structure de données utilisée dans PABLO, et notamment du fait que la numérotation des degrés de liberté, situés au centre des cellules, se fait avec l'indice de Morton. Une cellule a donc facilement accès à ses voisins directs mais la recherche des voisins plus éloignés est vite coûteuse. On note φ la solution du problème elliptique modèle suivant :

$$\nabla \cdot (-\mu \nabla \varphi) = f \text{ dans } \Omega$$

avec des conditions aux limites de Dirichlet ou de Neumann. On commence par calculer le gradient de φ sur les centres des cellules avec une méthode de moindres carrés. Soit K une cellule, sans perte de généralité on suppose que son centre est $x_k = \vec{0}$. On utilise la reconstruction de φ dans les cellules voisines définie par

$$\varphi^R(\vec{x}_Q) = \varphi(\vec{0}) + \nabla \varphi(\vec{0}) \cdot \vec{x}_Q \text{ pour toute cellule } Q \text{ voisine de } K.$$

On cherche à minimiser la fonctionnelle

$$I = \sum_{i \text{ voisins de } K} \frac{1}{2} \omega_i [\varphi(\vec{x}_i) - \varphi^R(\vec{x}_i)]^2, \text{ avec } \omega_i = \frac{1}{\|\vec{x}_i\|^p}$$

Le gradient de φ dans chaque cellule K est obtenu en minimisant la fonctionnelle I et donc en résolvant

$$\frac{\partial I}{\partial \nabla \varphi} = 0,$$

ce qui revient à résoudre un système linéaire local.

Pour calculer les gradients sur les interfaces entre les cellules, qui permettent d'obtenir les flux, on pondère ce calcul des gradients obtenus par moindre carrés en introduisant une correction le long de la direction joignant les centres des cellules considérées, en utilisant les notations de la Figure III.19 :

$$\begin{aligned} \nabla_{ij} \tilde{\varphi} &= \bar{\omega}_{ij} \nabla \varphi_i + (1 - \bar{\omega}_{ij}) \nabla \varphi_j, \\ \nabla_{ij}^* \varphi &= \nabla_{ij} \tilde{\varphi} - [\nabla_{ij} \tilde{\varphi} \cdot \vec{d}_{ij}] \vec{d}_{ij} + \frac{\varphi_j - \varphi_i}{|\vec{d}_{ij}|} \vec{d}_{ij}. \end{aligned}$$

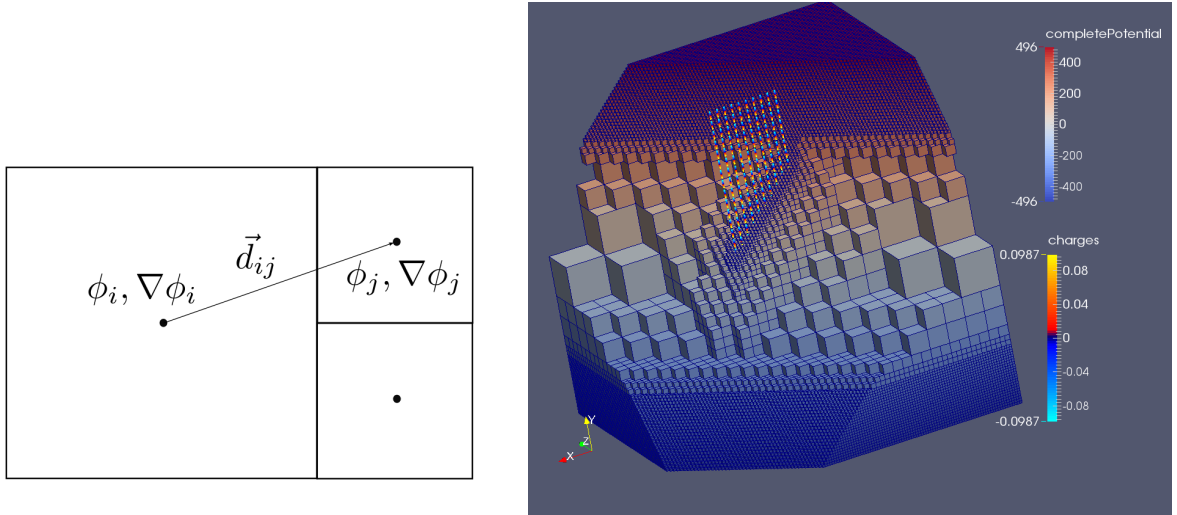


FIGURE III.19 – Gauche : notations pour le calcul des flux, droite : exemple en trois dimensions de solution pour le potentiel électrique obtenu autour de dix nanotubes de carbones

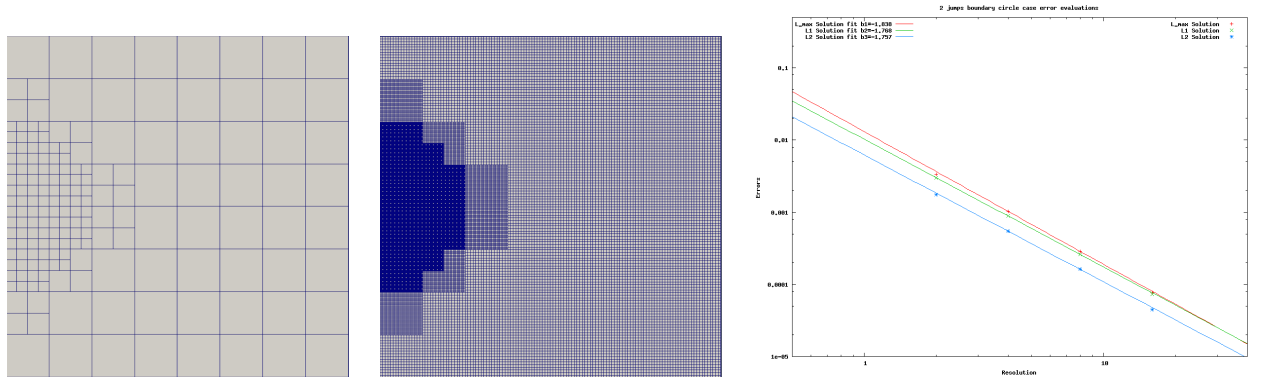


FIGURE III.20 – Exemple de raffinement de maillage octree et étude de convergence sur ce maillage

III.5.3 Résultats numériques

L'erreur de troncature de ce schéma est d'ordre deux quand la grille est uniforme, et d'ordre zéro sur les cellules pour lesquelles le schéma fait appel à des cellules de tailles différentes. Toutefois, on observe numériquement une convergence à l'ordre deux en norme L^∞ quand on raffine uniformément l'octree, comme on peut le constater sur la figure III.20. Nous cherchons à prouver théoriquement cette convergence, par exemple avec la méthodologie des fonctions de Green discrètes. Par ailleurs, dans le cas de schémas sur octrees, l'utilisation de fonctions de Green discrètes sur des cellules de taille différente pourrait éventuellement permettre d'étudier la précision du résultat numérique en fonction de la manière dont le raffinement spatial a été effectué.

En ce qui concerne l'application aux matériaux électrostrictifs, la méthode a été testée sur des cas préliminaires avec quelques nanotubes de carbone, par exemple celui présenté sur la figure III.19.

Chapitre IV

Conclusion

Les travaux présentés dans ce manuscrit portent donc sur la conception, la validation et l'analyse de schémas numériques sur grilles cartésiennes en présence de géométries complexes. Leur objectif est de maintenir près de ces frontières ou interfaces une précision suffisante pour ne pas affecter la solution dans le reste du domaine. En pratique, nous avons la plupart du temps cherché à obtenir une précision d'ordre deux qui est pour les applications considérées un bon compromis entre précision et complexité des schémas.

Suivant le type d'équations considéré, l'influence de l'erreur locale d'approximation sur le résultat est qualitativement différente. Pour les problèmes elliptiques il y a dans une certaine mesure compensation d'une erreur d'approximation plus forte si celle-ci est pratiquée seulement tout autour de l'interface ou de la frontière. Dans le cas des problèmes de transport, l'erreur se propage le long des caractéristiques, ce qui la rend plus difficile à contrôler.

Les stratégies à appliquer sont donc différentes suivant le contexte. Dans le cas des équations d'Euler compressibles, nous créons des états fictifs prenant en compte la condition de non-glissement à l'ordre deux, et nous devons parfois utiliser une extrapolation décentrée "upwind" pour tenir compte de la physique de l'écoulement. Pour la procédure de ré-initialisation de la level-set, nous utilisons un schéma d'ordre trois décentré près de l'isoline zéro, afin de respecter le sens de propagation de l'information, et seulement quand la déformation devient trop forte. Nous parvenons ainsi à obtenir une convergence à l'ordre trois en temps et en espace qui est nécessaire pour calculer une quantité telle que la courbure à l'interface. Dans le cas de la condition génératrice pour les équations de Boussinesq, l'idée est un peu différente : dans l'esprit de la méthode ILW (Inverse Lax Wendroff procédure [155]) nous utilisons l'équation d'évolution sur la hauteur d'eau pour transformer une dérivée en espace nécessaire dans les calculs en une dérivée en temps reliée à la condition génératrice qu'on souhaite imposer.

Pour les problèmes elliptiques avec une interface immergée, qui interviennent dans la modélisation de l'électroporation de cellules biologiques et dans la résolution de la pression pour des écoulements bifides, on utilise des inconnues supplémentaires sur l'interface, qui permettent d'obtenir une erreur de troncature d'ordre un pour l'opérateur elliptique près de la frontière et d'ordre deux pour les flux au travers de l'interface. Cette approximation moins précise est compensée par celle d'ordre deux dans tout le reste du domaine, et on obtient donc de l'ordre deux en norme L^∞ . Dans le cas du schéma de Shortley-Weller, un phénomène un peu plus inattendu se produit : la convergence est d'ordre deux à la fois pour la solution et le gradient, malgré une erreur de troncature d'ordre un sur la frontière. Cela est dû au fait que l'erreur d'approximation sur le bord du domaine a moins d'influence sur l'erreur globale que celle à l'intérieur du domaine. Dans le cas du schéma sur octrees, on observe aussi une convergence à l'ordre deux alors que la méthode n'est pas consistante au sens des différences finies sur les cellules dans les zones où le raffinement varie.

En ce qui concerne les équations de Boussinesq, une prolongation du travail serait d'essayer d'étendre la méthodologie pour traiter des conditions aux limites sortantes. On pourrait aussi essayer de l'étendre au cas de modèles plus fortement non-linéaires.

Dans le cas d'écoulements compressibles non visqueux en présence d'un obstacle, la méthode qui a été présentée garantit une bonne précision si l'obstacle ne bouge pas. S'il est en mouvement, on observe des oscillations parasites qui détériorent les résultats, dues probablement au fait que des cellules fluides disparaissent ou apparaissent et au manque de conservativité qui en résulte. Améliorer la conservativité près de la frontière solide pourrait résoudre au moins partiellement ce problème. L'idée ne serait pas de concevoir une méthode complètement conservative, mais plutôt d'approximer les quantités conservatives du fluide contenues dans les cellules près de la frontière et de construire le schéma de manière à respecter la conservation de ces quantités à un certain ordre, de la même manière que la condition au bord est imposée implicitement à l'ordre deux.

Dans le cas des écoulements incompressibles bifluides, la priorité serait d'implanter la méthode en trois dimensions dans le code NaSCar, afin de pouvoir évaluer son comportement dans des cas plus réalistes. Par ailleurs, améliorer la conservativité de l'étape de prédiction serait certainement une piste intéressante pour améliorer la précision et la stabilité de la méthode. L'idée serait comme dans d'autres références d'utiliser la forme conservative des équations de Navier-Stokes près de l'interface entre les fluides. On ne chercherait pas forcément à être parfaitement conservatif, mais plutôt à garantir que les transferts de masse et de quantité de mouvement entre les fluides restent négligeables, par exemple d'ordre deux, au cours de la simulation. Une autre piste intéressante pour les écoulements bifluides serait d'essayer de formuler une version incrémentale de la méthode, c'est-à-dire où une pression prédite est utilisée dans l'étape de prédiction. L'étape de correction servirait alors juste à calculer un ajustement de la valeur de la pression. Cela n'est pas courant à ma connaissance pour ce type de méthode, mais le fait de passer à une version incrémentale permettrait à la fois d'améliorer la précision de la méthode, en obtenant un ordre plus élevé par rapport au pas de temps, et probablement aussi de simplifier le traitement des conditions aux limites. En effet, les conditions aux limites à imposer pour l'équation sur la correction de pression ont d'autant plus d'influence que l'amplitude de la quantité calculée dans cette étape est importante.

L'étude de la méthode pour résoudre des problèmes elliptiques avec des interfaces immergées, qui a été justement modifiée dans le cas bifluide afin de garantir sa monotonie, m'a amenée à m'intéresser à la manière de prouver que cette méthode converge effectivement à l'ordre deux. Pour le moment, la preuve a été réalisée seulement pour une version à l'ordre un, mais je pense qu'il est possible soit d'adapter le stencil de la méthode, soit d'utiliser des techniques un peu différentes pour montrer la convergence dans le cas de la version d'ordre deux. En tout cas, cette méthodologie basée sur les fonctions de Green discrètes permet d'étudier la convergence de méthodes de type frontières immergées sur grilles cartésiennes. Une étude en cours concerne la méthode Ghost-Fluid [117]. En effet, à ma connaissance, sa convergence a seulement été prouvée dans [119] en reformulant la méthode comme une formulation faible discrète, de manière similaire à des éléments finis, avec pour résultat que la méthode converge faiblement vers la solution sans taux de convergence associé. Le but serait d'utiliser les fonctions de Green discrètes pour montrer la convergence à l'ordre un en norme L^∞ qui est constatée numériquement. Or cette méthode a formellement une erreur de troncature en $O(1/h)$ sur les points de grille près de l'interface. Cela signifie qu'un raisonnement comme celui de la sous-section III.4.3 ne suffit pas à montrer la convergence, et qu'il faut montrer qu'il y a une compensation mutuelle des termes de l'erreur de troncature le long de l'interface. Enfin, l'étude de schémas sur octree a juste été amorcée, et il serait intéressant d'expliquer pourquoi la méthode converge à l'ordre deux tout en étant non-consistante sur les zones de raccord entre différentes tailles de discrétisation.

Par ailleurs, j'ai récemment décidé de marquer un tournant dans mes activités de recherche, pour m'intéresser à la résolution numérique de problèmes inverses en électrocardiographie, dans le cadre de l'équipe INRIA Carmen et de l'IHU Liryc, dédié à la compréhension des troubles du rythme cardiaque. Le but général de l'étude de ces problèmes inverses est de calculer de manière fiable le potentiel électrique sur la surface du coeur à partir de mesures de ce potentiel sur le torse. Ce type de problème inverse est mal posé et très instable numériquement. En conséquence, le but recherché n'est pas tant de parvenir à produire une méthode numérique d'ordre élevé que d'assurer une prédiction fiable.

Ce problème est donc très différent qualitativement de ceux que j'ai étudiés jusqu'à présent. Cependant certaines techniques ou méthodes présentées dans ce mémoire pourront m'être utiles. En ce qui concerne la modélisation physique ou numérique, les équations régissant la propagation du champ électrique sur le coeur ne sont pas très différentes de celles que j'ai rencontrées dans le contexte de l'électroporation de cellules biologiques. L'étude des mécanismes reliant l'erreur d'approximation d'un schéma numérique à son taux de convergence m'a permis de mieux comprendre les propriétés des matrices inverses des opérateurs elliptiques discrets.

Du point de vue des méthodes, l'algorithme de transport optimal de la section II.4 pourrait être utilisé pour évaluer des vitesses de propagation du champ électrique sur le coeur à partir des potentiels électriques reconstruits numériquement à des intervalles de temps successifs. De plus, mon expérience en méthodes de frontières immergées pourrait me servir à développer des méthodes sur grilles cartésiennes pour ce type de problème inverse, alors que pour le moment, ce sont plutôt des méthodes d'éléments finis sur maillages adaptés qui sont utilisées, sans que l'influence du maillage sur le résultat du problème inverse ne soit très claire.

Bibliographie

- [1] S. Abarbanel, A. Ditzkowski, and B. Gustafsson. On error bounds of finite difference approximations to partial differential equations - temporal behaviour and rate of convergence. *Journal of Scientific Computing*, 15(1) :79–116, 2000.
- [2] M. B. Abbott, H. M. Petersen, and O. Skovgaard. Computations of shortwaves in shallow water. *Coast. Eng. Proc.*, pages 414–433, 1978.
- [3] R. Abgrall, H. Beaugendre, and C. Dobrzynski. An immersed boundary method using unstructured anisotropic mesh adaptation combined with level-sets and penalization techniques. *J. Comput. Phys.*, 257 :83–101, 2014.
- [4] B. Alvarez-Samaniego and D. Lannes. Large time existence for 3d water-waves and asymptotics. *Invent. math.*, 171 :485–541, 2008.
- [5] B. Andreianov, F. Boyer, and F. Hubert. Discrete duality finite volume schemes for leray-lions type elliptic problems on general 2d meshes. *Numer. Meth. for PDEs*, 23 :145–195, 2007.
- [6] P. Angot, C.-H. Bruneau, and P. Fabrie. A penalization method to take into account obstacles in incompressible flows. *Numer. Math.*, 81(4) :497–520, 1999.
- [7] E. Arquis and J.P. Caltagirone. Sur les conditions hydrodynamiques au voisinage d’une interface milieu fluide-milieux poreux : application la convection naturelle. *C.R. Acad. Sci. Paris II*, 299 :1–4, 1984.
- [8] Satish Balay, Jed Brown, Kris Buschelman, William D. Gropp, Dinesh Kaushik, Matthew G. Knepley, Lois Curfman McInnes, Barry F. Smith, and Hong Zhang. PETSc Web page, 2009. <http://www.mcs.anl.gov/petsc>.
- [9] J. T. Beale. Smoothing properties of implicit finite difference methods for a diffusion equation in maximum norm. *SIAM J. Numer. Anal.*, 47 :2476–2495, 2009.
- [10] J. T. Beale. Uniform error estimates for navier-stokes flow with an exact moving boundary using the immersed interface method. *SIAM J. Numer. Anal.*, 53 :2097–2111, 2015.
- [11] J. T. Beale and A. T. Layton. On the accuracy of finite difference methods for elliptic problems with interfaces. *Commun. Appl. Math. Comput. Sci.*, 1 :91–119, 2006.
- [12] John B. Bell, Phillip Colella, and Harland M. Glaz. A second-order projection method for the incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 85(2) :257–283, 1989.
- [13] J-D. Benamou and Y. Brenier. A computational fluid mechanics solution to the Monge–Kantorovich mass transfer problem. *Numerische Mathematik*, 84 :375–393, 2000.
- [14] W. Benz. *The Numerical Modelling of Nonlinear Stellar Pulsations, Problems and Prospects*, chapter Smooth Particle Hydrodynamics : A Review, pages 269–287. NATO ASIS Series, 1989.
- [15] M.J. Berger, C. Helzel, and R.J. LeVeque. h-box methods for the approximation of hyperbolic conservation laws on irregular grids. *SIAM J. on Numer. Analysis*, 41(3) :893–918, 2004.
- [16] M.J. Berger and R.J. LeVeque. An adaptive cartesian mesh algorithm for the euler equations in arbitrary geometries, 1989.
- [17] M.J. Berger and R.J. LeVeque. Stable boundary conditions for cartesian grid calculations. *Computing systems in Engineering*, 1(2-4) :305–311, 1990.
- [18] M. Bergmann, C. Galusinski, A. Iollo, and L. Weynans. Drag and drop simulations : from images to full 3d simulations, proc. of the eighth international conference on computational fluid dynamics, chengdu, china, 2014.
- [19] M. Bergmann, J. Hovnanian, and A. Iollo. An accurate cartesian method for incompressible flows with moving boundaries. *Communications in Computational Physics*, 15(5) :1266–1290, 05/2014.

- [20] M. Bergmann, F. Luddens, and L. Weynans. A sharp cartesian method for the simulation of air-water interface, proc. of the eighth international conference on computational fluid dynamics, chengdu, china, 2014.
- [21] M. Bergmann, F. Luddens, and L. Weynans. Enablers for high order level set methods in fluid mechanics. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 79 :654–675, 2015.
- [22] M. Bergmann and L. Weynans. A sharp cartesian method for incompressible flows with large density ratios. Technical Report RR8926, INRIA Research Report, 2016.
- [23] C. Besse, B. Mesognon-Giraud, and P. Noble. Artificial boundary conditions for the linearized benjamin-bona-mahony equation. *Numer. Math.*, 139 :281–314, 2018.
- [24] C. Besse, P. Noble, and D. Sanchez. Discrete transparent boundary conditions for the mixed kdv-bbm equation. *J. Comput. Phys.*, 345 :484–509, 2017.
- [25] P. Bethelsen. A decomposed immersed interface method for variable coefficient elliptic equations with non-smooth and discontinuous solutions. *J. Comput. Phys.*, 197 :364–386, 2004.
- [26] W.-J. Beyn. The exact order of convergence for finite difference approximations to ordinary boundary value problems. *Math. Comput.*, 33 :1213–1228, 1979.
- [27] Francois Bouchon, Thierry Dubois, and Nicolas James. A second-order cut-cell method for the numerical simulation of 2d flows past obstacles. *Computers and Fluids*, 65 :80–91, 2012.
- [28] A. Bouharguane, A. Iollo, and L. Weynans. Numerical solution of the monge-kantorovich problem by density lift-up continuation. *ESAIM : M2AN*, 49 :1577–1592, 2015.
- [29] J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.*, 100(2) :335–354, 1992.
- [30] J. H. Bramble and B. E. Hubbard. On the formulation of finite difference analogues of the dirichlet problem for poisson’s equation. *Numer. Math.*, 4 :313–327, 1962.
- [31] J. H. Bramble, B. E. Hubbard, and Vidar Thomee. Convergence estimates for essentially positive type discrete dirichlet problems. *Mathematics of Computation*, 23 :695–709, 1969.
- [32] A. Brandt. Generalized local maximum principles for finite-difference operators. *Math. Comput.*, 27 :685–718, 1973.
- [33] A. Brandt. Interior estimates for second-order elliptic differential (or finite-difference) equations via the maximum principle. *Israel Journal of Mathematics*, 7 :95–121, 1973.
- [34] Y. Brenier. Polar factorization and monotone rearrangement of vector-valued functions. *Communication in Pure and Applied Mathematics*, 64 :375–417, 1991.
- [35] D. Bresch, T. Colin, E. Grenier, B. Ribba, and O. Saut. Computational modeling of solid tumor growth : the avascular stage. *SIAM J. Sci. Comput.*, 32 :2321–2344, 2010.
- [36] F. Buret, N. Faure, L. Nicolas, R. Perussel, and C. Poinard. Numerical studies on the effect of electric pulses on an egg-shaped cell with a spherical nucleus. Technical Report RR-7270, INRIA, 2010.
- [37] P. Chatelain, G.-H. Cottet, and P. Koumoutsakos. Particle-mesh hydrodynamics and astrophysics simulation. *International Journal of Modern Physics C*, 18 :610–618, 2007.
- [38] Y. Cheny and O. Botella. The ls-stag method : A new immersed boundary/level-set method for the computation of incompressible viscous flows in complex moving geometries with good conservation properties. *J. Comput. Phys.*, 229 :1043–1076, 2010.
- [39] A.J. Chorin. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Math. Comp.*, 22 :745–762, 1968.
- [40] P. G. Ciarlet. Discrete maximum principle for finite-difference operators. *Aequationes Mathematicae*, 4 :338–352, 1970.
- [41] P.G. Ciarlet and R.S. Varga. Discrete variational green functions. *Numer. Math.*, 16 :115–128, 1970.
- [42] M. Cisternino and L. Weynans. A parallel second order cartesian method for elliptic interface problems. *Commun. Comput. Phys.*, 12 :1562–1587, 2012.
- [43] C.Min, F. Gibou, and H.D. Ceniceros. A supra-convergent finite difference scheme for the variable coefficient poisson equation on non-graded grids. *J. Comput. Phys.*, 218 :123–140, 2006.
- [44] W.J. Coirier and K.G. Powell. An accuracy assessment of cartesian mesh approaches for the euler equations. *J. Comput. Phys.*, 117 :121–131, 1995.

- [45] P. Colella, D.T. Graves, B.J. Keen, and D. Modiano. A cartesian grid embedded boundary method for hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 211(1) :347–366, 2006.
- [46] M. Coquerelle and G.-H. Cottet. A vortex level set method for the two-way coupling of an incompressible fluid with colliding rigid bodies. *J. Comput. Phys.*, 227 :9121–9137, 2008.
- [47] G.-H. Cottet, J.-M. Etancelin, F. Perignon, and C. Picard. High order semi-lagrangian particles for transport equations : numerical analysis and implementation issues. *ESAIM : Math. Modell. Numer. Anal.*, 48 :1029–1060, 2014.
- [48] G.-H. Cottet and P. D. Koumoutsakos. *Vortex methods*. Cambridge University Press, 2000.
- [49] G.-H. Cottet and A. Magni. TVD remeshing schemes for particle methods. *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I*, 347 :1367–1372, 2009.
- [50] G.-H. Cottet and L. Weynans. Particle methods revisited : a class of high-order finite-difference schemes. *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I*, 343 :51–56, 2006.
- [51] F. Couderc. *Développement d'un code de calcul pour la simulation d'écoulements de fluides non miscibles : application à la désintégration assistée d'un jet liquide par un courant gazeux*. PhD thesis, ENSAE, Toulouse, 2007.
- [52] Y. Coudiere and F. Hubert. A 3d discrete duality finite volume method for nonlinear elliptic equation. *SIAM J. Sci. Comput.*, 33 :1739–1764, 2011.
- [53] Y. Coudiere and P. Villedieu. A comparison of spectral and vortex methods in three-dimensional incompressible flow. *ESAIM : Math. Modell. Numer. Anal.*, 34 :1123–1149, 2000.
- [54] A. Ghoniem D. Wee. Modified interpolation kernels for treating diffusion and remeshing in vortex methods. *J. Comput. Phys.*, 213 :239–263, 2006.
- [55] A. Dadone and B. Grossman. Ghost-cell method for analysis of inviscid three dimensionnal flows on cartesian grids. *Computers and Fluids*, 36 :1513–1528, 2007.
- [56] K. DeBruin and W. Krassowska. Modelling electroporation in a single cell. I. Effects of field strength and rest potential. *Biophysical Journal*, 77 :1213–1224, Sept 1999.
- [57] O. Desjardins and H. Pitsch. A spectrally refined interface approach for simulating multiphase flows. *J. Comput. Phys.*, 228 :1658–1677, 2009.
- [58] M. Detrixhe, F. Gibou, and C. Min. A parallel fast sweeping method for the eikonal equation. *J. Comput. Phys.*, 237 :46–55, 2013.
- [59] K. Domelevo and P. Omnes. A finite volume method for the laplace equation on almost arbitrary two-dimensional grids. *ESAIM : Math. Model. Numer. Anal.*, 39 :1203–1249, 2005.
- [60] A. Draganescu, T.F. Dupont, and L.R. Scott. Failure of the discrete maximum principle for an elliptic finite element problem. *Math. Comput.*, 74 :1–23, 2005.
- [61] A. du Chene, C. Min, and F. Gibou. Second-order accurate computation of curvatures in a level set framework using novel high-order reinitialization schemes. *J. Sci. Comput.*, 35(114–131), 2008.
- [62] Antoine du Chéné, Chohong Min, and Frédéric Gibou. Second-order accurate computation of curvatures in a level set framework using novel high-order reinitialization schemes. *J. Sci. Comput.*, 35(2-3) :114–131, 2008.
- [63] A. duChene, C. Min, and F. Gibou. Second-order accurate computation of curvatures in a level set framework using novel high-order reinitialization schemes. *J. Sci. Comput.*, 35 :114–131, 2008.
- [64] M. W. Evans and F. H. Harlow. The particle-in-cell method for hydrodynamics calculations. Technical report, Los Alamos Scientific Laboratory, 1956.
- [65] R.P. Fedkiw. Coupling an eulerian fluid calculation to a lagrangian solid calculation with the ghost fluid method. *J. Comput. Phys.*, 175 :200–224, 2002.
- [66] R.P. Fedkiw, T. Aslam, B. Merriman, and S. Osher. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *J. Comput. Phys.*, 152 :457–492, 1999.
- [67] J.A. Ferreira and R.D. Grigorieff. On the supraconvergence of elliptic finite difference schemes. *Applied Num. Math.*, 28 :275–292, 1998.
- [68] A. G. Filippini, S. Bellec, M. Colin, and M. Ricchiuto. On the nonlinear behaviour of boussinesq type models : Amplitude-velocity vs amplitude-flux forms. *Coastal Engineering*, 99 :109–123, 2015.

- [69] H. Forrer and R. Jeltsch. A high order boundary treatment for cartesian grid methods. *J. Comput. Phys.*, 140 :259–277, 1998.
- [70] M. L. Hunt G. G. Joseph, R. Zenit and A. M. Rosenwinkel. Particle-wall collisions in a viscous fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 433 :329–346, 04/2001.
- [71] C. Galusinski and P. Vigneaux. On stability condition for bifluid flows with surface tension : Application to microfluidics. *J. Comput. Phys.*, 227 :6140–6164, 2008.
- [72] F. Gibou, L. Chen, D. Nguyen, and S. Banerjee. A level set based sharp interface method for the multiphase incompressible navier–stokes equations with phase change. *J. Comput. Phys.*, 222 :536–555, 2007.
- [73] F. Gibou and R.P. Fedkiw. A fourth order accurate discretization for the laplace and heat equations on arbitrary domains, with applications to the stefan problem. *J. Comput. Phys.*, 202 :577–601, 2005.
- [74] R. A. Gingold and J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics : theory and application to non-spherical stars. *Mon. Not. R. Astr. Soc.*, 181 :375–389, 1977.
- [75] Y. Gorsse, A. Iollo, H. Telib, and L. Weynans. A simple second order cartesian scheme for compressible euler flows. *J. Comput. Phys.*, 231 :7780–7794, 2012.
- [76] Y. Gorsse, A. Iollo, and L. Weynans. A simple second order cartesian scheme for compressible flows. *Springer Proceedings in Mathematics*, 4 :543–551, 2011.
- [77] N. Grenier, M. Antuono, A. Colagrossi, D. Le Touze, and B. Alessandrini. An hamiltonian interface sph formulation for multi-fluid and free-surface flows. *J. Comput. Phys.*, 228 :8380–8393, 2009.
- [78] B. Gustafsson. The convergence rate for difference approximations to general initial boundary value problems. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 18 :179–190, 1981.
- [79] Grégory Guyomarc’h, Chang-Ock Lee, and Kiwan Jeon. A discontinuous Galerkin method for elliptic interface problems with application to electroporation. *Comm. Numer. Methods Engrg.*, 25(10) :991–1008, 2009.
- [80] S. Harada, T. Tanaka, and Y. Tsuji. Fluid force acting on a particle falling toward a wall. *JSME International Journal Series B*, 44(4) :520–525, 11/2001.
- [81] F. Harlow and J. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys. Fluids*, 8 :2182–2189, 1965.
- [82] F. H. Harlow. Hydrodynamic problems involving large fluid distorsion. *J. Assoc. Comp. Mach.*, 4 :137–142, 1957.
- [83] M. Herrmann. The influence of density ratio on the primary atomization of a turbulent jet in crossflow. *Proc. Combust. Inst.*, 33 :2079–2088, 2011.
- [84] C.W. Hirt and B.D. Nichols. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundarie. *J. Comput. Phys.*, 39(1) :201 – 225, 1981.
- [85] X.Y. Hu, B. C. Khoo, N. A. Adams, and F. L. Huang. A conservative interface method for compressible flows. *J. Comput. Phys.*, 219 :553–578, 2006.
- [86] H. Huang and Z. Li. Convergence analysis of the immersed interface method. *IMA J. Numer. Anal.*, 19 :583–608, 1999.
- [87] Chern I. and Shu Y.-C. A coupling interface method for elliptic interface problems. *J. Comput. Phys.*, 225 :2138–2174, 2007.
- [88] T. Iguchi. A shallow water approximation for water waves. *J. Math. Kyoto Univ.*, 49 :13–55, 2009.
- [89] T. Iguchi and D. Lannes. Hyperbolic free boundary problems and applications to wave-structure interactions.
- [90] A. Ivorra, J. Villemejane, and L.M. Mir. Electrical modeling of the influence of medium conductivity on electro-poration. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 12(34) :10055–10064, 2010.
- [91] E. Izard, T. Bonometti, and L. Lacaze. Modelling the dynamics of a sphere approaching and bouncing on a wall in a viscous fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 747 :422–446, 2014.
- [92] Guang-Shan Jiang and Danping Peng. Weighted ENO schemes for Hamilton-Jacobi equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(6) :2126–2143 (electronic), 2000.
- [93] H. Johansen and P. Colella. A cartesian grid embedded boundary method for poisson’s equation on irregular domains. *J. Comput. Phys.*, 147 :60–85, 1998.
- [94] G. G. Joseph and M. L. Hunt. Oblique particle-wall collisions in a liquid. *Journal of Fluid Mechanics*, 510 :71–93, 2004.

- [95] Myungjoo Kang, Ronald P. Fedkiw, and Xu-Dong Liu. A boundary condition capturing method for multiphase incompressible flow. *Journal of Scientific Computing*, 15(3) :323–360, 2000.
- [96] O. Kavian, M. Leguebe, C. Poignard, and L. Weynans. Classical electropermeabilization modeling at the cell scale. *J. Math. Biol.*, 68 :235–265, 2014.
- [97] O. Kavian, M. Leguebe, C. Poignard, and L. Weynans. Classical electropermeabilization modeling at the cell scale. *J. Math. Biol.*, 68 :235–265, 2014.
- [98] M. Kazakova. *Dispersive models of ocean waves propagation : Numerical issues and modelling*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2018.
- [99] J. Kim, D. Kim, and H. Choi. An immersed boundary finite volume method for simulations of flow in complex geometries. *J. Comput. Phys.*, 171 :132–150, 2001.
- [100] P. Koumoutsakos. Inviscid axisymmetrization of an elliptical vortex. *J. Comput. Phys.*, 138 :821–857, 1997.
- [101] J.-B. Lagaert, G. Balarac, and G.-H. Cottet. Hybrid spectral particle method for the turbulent transport of a passive scalar. *J. Comp. Phys.*, 260 :127–142, 2014.
- [102] I. Lagrange. *Methode d’interface immergee pour la simulation directe de l’atomisation primaire*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2017.
- [103] B. Lambert, M. Bergmann, and L. Weynans. Local lubrication model for spherical particles within an incompressible navier-stokes flow. *Phys. Rev. E*, 97 :033313, 2018.
- [104] D. Lannes. *The Water Waves Problem : Mathematical Analysis and Asymptotics*, volume 188. Mathematical Surveys and Monographs, AMS, 2013.
- [105] D. Lannes and L. Weynans. Generating boundary conditions for a Boussinesq system, en preparation.
- [106] N. Lanson and J.P. Vila. Convergence des méthodes particulières renormalisées pour les systèmes de Friedrichs. *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser I*, 349 :465 – 470, 2005.
- [107] N. Lanson and J.P. Vila. Renormalized meshfree schemes II : convergence for scalar conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.*, 46 :1935–1964, 2008.
- [108] B. Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme i. the quest of monotonicity. *Lecture notes in Physics*, 18 :163, 1972.
- [109] M. Leguebe, C. Poignard, and L. Weynans. A second-order cartesian method for the simulation of electropermeabilization cell models. *J. Comput. Phys.*, 292 :114–140, 2015.
- [110] R.J. Leveque and Z. Li. The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources. *SIAM Numerical Analysis*, 31(4) :1019–1044, 1994.
- [111] T.-T. Li and W.-C. Yu. Boundary value problems for quasilinear hyperbolic systems. *Duke University Mathematics ser.*, 5, 1985.
- [112] Z. Li, H. Ji, and X. Chen. Accurate solution and gradient computation for elliptic interface problems with variable coefficients. *SIAM J. Numer. Anal.*, 55 :570–597, 2017.
- [113] Z.-C. Li, H.-Y. Hu, S.T. Wang, and Q. Fang. Superconvergence of solution derivatives for the Shortley-Weller difference approximation to Poisson’s equation with singularities on polygonal domains. *Applied Num. Math.*, 58 :689–704, 2008.
- [114] Z.-C. Li, T. Yamamoto, and Q. Fang. Superconvergence of solution derivatives for the Shortley-Weller difference approximation of Poisson’s equation. part i : smoothness problems. *J. Comp. Applied Math.*, 151 :307–333, 2003.
- [115] Z.L. Li. A fast iterative algorithm for elliptic interface problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 35 :230–254, 1998.
- [116] Z.L. Li and K. Ito. Maximum principle preserving schemes for interface problems with discontinuous coefficients. *SIAM J. Sci. Comput.*, 23 :339–361, 2001.
- [117] X.-D. Liu, R. Fedkiw, and M. Kang. A boundary condition capturing method for poisson’s equation on irregular domains. *J. Comput. Phys.*, 160 :151–178, 2000.
- [118] X.-D. Liu, R. P. Fedkiw, and M. Kang. A boundary capturing method for poisson’s equation on irregular domains. *J. Comput. Phys.*, 160 :151–178, 2000.
- [119] X.-D. Liu and T. Sideris. Convergence of the ghost fluid method for elliptic equations with interfaces. *Math. Comput.*, 72 :1731–1746, 2003.

- [120] Gregoire Loeper and Francesca Rapetti. Numerical solution of the monge-ampere equation by a newton's algorithm. *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I*, 340 :319–324, 2005.
- [121] F. Losasso, F. Gibou, and R. Fedkiw. Simulating water and smoke with an octree data structure. *ACM transactions on graphics*, 23 :457–462, 2004.
- [122] F. Luddens, M. Bergmann, and L. Weynans. Enablers for high-order level set methods in fluid mechanics. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 79 :654–675, 2015.
- [123] A. Magni and G.-H. Cottet. Accurate, non-oscillatory, remeshing schemes for particle methods. *J. Comput. Phys.*, 231(1) :152–172, 2012.
- [124] A. Majda and S. Osher. Numerical viscosity and the entropy condition. *Comm. Pure Appl. Math.*, 32 :797–838, 1979.
- [125] F. Marche. *Theoretical and Numerical Study of Shallow Water Models. Applications to Nearshore Hydrodynamics*. PhD thesis, University Bordeaux 1, 2005.
- [126] J. C. Martin and W. J. Moyce. An experimental study of the collapse of liquid columns on a rigid horizontal plane. *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A*, 244 :312–324, 1952.
- [127] M. Matsunaga and T. Yamamoto. Superconvergence of the Shortley-Weller approximation for Dirichlet problems. *J. Comp. Applied Math.*, 116 :263–273, 2000.
- [128] C. Mimeau, G.-H. Cottet, and I. Mortazavi. Direct numerical simulations of three-dimensional flows past obstacles with a vortex penalization method. *Computers and Fluids*, 183 :331–347, 2016.
- [129] R. Mittal, H. Dong, M. Bozkurtas, F.M. Najjar, A. Vargas, and A. Von Loebbecke. A versatile sharp interface immersed boundary method for incompressible flows with complex boundaries. *J. Comput. Phys.*, 227 :4825–4852, 2008.
- [130] J. J. Monaghan. Why particle methods work. *SIAM J. Sci. Stat. Comput*, 3(4) :422–433, 1982.
- [131] J. J. Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics. *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, 30 :543–574, 1992.
- [132] B. Ben Moussa and J.P. Vila. Convergence of SPH methods for scalar nonlinear conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.*, 37(3) :863–887, 2000.
- [133] S. Osher and R. Fedkiw. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer, 2003.
- [134] Stanley Osher and James A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed : algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *J. Comput. Phys.*, 79(1) :12–49, 1988.
- [135] J. Westerweel P. Costa, B. J. Boersma and W. P. Breugem. Collision model for fully-resolved simulations of flows laden with finite-size particles. *Physical Review E*, 92(5), 10/2015.
- [136] M. Lance P. Gondret and L. Petit. Bouncing motion of spherical particles in fluids. *Physics of Fluids*, 14(2) :643–652, 2002.
- [137] N. Papadakis, G. Peyré, and E. Oudet. Optimal transport with proximal splitting. *SIAM on Journal on Imaging Sciences*, 7 :212–238, 2014.
- [138] R.B. Pember, J.B. Bell, P. Colella, W.Y. Crutchfield, and M.L. Welcome. An adaptive cartesian grid method for unsteady compressible flows in irregular regions. *J. Comput. Phys.*, 120 :278–304, 1995.
- [139] C.S. Peskin. The fluid dynamics of heart valves : experimental, theoretical and computational methods. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 14 :235–259, 1981.
- [140] M. Petcu and R. Temam. The one-dimensional shallow water equations with transparent boundary conditions. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 36 :1979–1994, 2013.
- [141] S. Popinet. Gerris : a tree-based adaptive solver for the incompressible euler equations in complex geometries. *J. Comput. Phys.*, 190 :572–600, 2003.
- [142] M Puscas and L Monasse. A three-dimensional conservative coupling method between an inviscid compressible flow and a moving rigid solid. *SIAM J. Sci. Comput.*, 37 :884–909, 2015.
- [143] M. Raessi and H. Pitsch. Consistent mass and momentum transport for simulating incompressible interfacial flows with large density ratios using the level set method. *Computers and Fluids*, 63 :70–81, 2012.
- [144] Elisabeth Rouy and Agnès Tourin. A viscosity solutions approach to shape-from-shading. *SIAM J. Numer. Anal.*, 29(3) :867–884, 1992.

- [145] M. Rudman. A volume-tracking method for computing incompressible multifluid flows with large density variations. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 28 :357–378, 1998.
- [146] Giovanni Russo and Peter Smereka. A remark on computing distance functions. *J. Comput. Phys.*, 163(1) :51–67, 2000.
- [147] Y. Saad. Sparskit a basic tool-kit for sparse matrix computations. <http://www-users.cs.umn.edu/saad/software/SPARSKIT/sparskit.html>.
- [148] L.-P. Saumier, M. Agueh, and B. Khouider. An efficient numerical algorithm for the l2 optimal transport problem with periodic densities. *IMA Journal of Applied Mathematics*, 2013.
- [149] R. Scott. Optimal linfty estimates for the finite element method on irregular meshes. *Math. Comput.*, 30 :681–697, 1976.
- [150] J. Seo, S. Ha, and C. Min. Convergence analysis in the maximum norm of the numerical gradient of the shortley-weller method. *J. Sci. Comput.*, 74 :631–639, 2017.
- [151] J. A. Sethian. A fast marching level set method for monotonically advancing fronts. *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.*, 93(4) :1591–1595, 1996.
- [152] M. Sussman and E. G. Puckett. A coupled level set and volume of fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 162 :301–337, 2000.
- [153] M. Sussman, K. M. Smith, M. Y. Hussaini, M. Ohta, and R. Zhi-Wei. A sharp interface method for incompressible two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 221 :469–505, 2007.
- [154] Mark Sussman, Peter Smereka, and Stanley Osher. A level-set approach for computing solutions to incompressible two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 114 :146–159, 1994.
- [155] S. Tan and C.-W. Shu. Inverse lax-wendroff procedure for numerical boundary conditions of conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 229 :8144–8166, 2010.
- [156] S. Tanguy, T. Menard, and A. Berlemont. A level set method for vaporizing two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 221 :837–853, 2007.
- [157] R. Temam. Sur l’approximation de la solution des equations de navier-stokes par la methode des pas fractionnaires ii. *Archiv. Rat. Mech. Anal.*, 32 :377–385, 1969.
- [158] V. Thomee and B. Westergreen. Elliptic difference equations and interior regularity. *Numer. Math.*, 1 :196 – 210, 1968.
- [159] G. Tryggvason, R. Scardovelli, and S. Zaleski. *Direct numerical simulations of gas-liquid multiphase flows*. Cambridge University Press, Berlin, 2011.
- [160] Yen-Hsi Richard Tsai, Li-Tien Cheng, Stanley Osher, and Hong-Kai Zhao. Fast sweeping algorithms for a class of Hamilton-Jacobi equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 41(2) :673–694, 2003.
- [161] Y. Tseng and J. Ferziger. A ghost cell immersed boundary method for flow in complex geometry. *J. Comput. Phys.*, 192 :593 – 623, 2003.
- [162] John C. Vassberg and Antony Jameson. In pursuit of grid convergence for two-dimensional euler solutions. *Journal of Aircraft*, 47(4) :1152–1166, 2010.
- [163] T. Vejchodsky and P. Solin. Discrete maximum principle for higher-order finite elements in 1d. *Math. Comput.*, 76 :1833–1846, 2007.
- [164] C. Villani. *Topics in optimal transportation*. American Mathematical Society, 1st edition, 2003.
- [165] C. Villani. *Optimal Transport, old and new*. Springer-Verlag, 1st edition, 2009.
- [166] L. Weynans. *Méthode particulière multi-niveaux pour la dynamique des gaz, application au calcul d’écoulements multifluides*. PhD thesis, Université Joseph Fourier, <http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00121346/en/>, 2006.
- [167] L. Weynans. Convergence of a cartesian method for elliptic problems with immersed interfaces. Technical Report RR8872, INRIA Research Report, 2008.
- [168] L. Weynans. Super-convergence in maximum norm of the gradient for the shortley-weller method. *J. Sci. Comput.*, 75(625-637), 2018.
- [169] L. Weynans. Super-convergence in maximum norm of the gradient for the shortley-weller method. *J. Sci. Comput.*, 75 :625–637, 2018.

- [170] L. Weynans and A. Magni. Consistency, accuracy and entropy behaviour of remeshed particle methods. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 47 :57–81, 1 2013.
- [171] A. Wiegmann and K. Bube. The explicit jump immersed interface method : finite difference method for PDEs with piecewise smooth solutions. *SIAM J. Numer. Anal.*, 37(3) :827–862, 2000.
- [172] G. Yoon and C. Min. Convergence analysis of the standard central finite difference method for Poisson equation. *J Sci Comput*, 67 :602–617, 2016.
- [173] Yong-Tao Zhang, Hong-Kai Zhao, and Jianliang Qian. High order fast sweeping methods for static Hamilton-Jacobi equations. *J. Sci. Comput.*, 29(1) :25–56, 2006.
- [174] H. Zhao. A fast sweeping method for eikonal equations. *Math. Comp.*, 74(250) :603–627, 2005.
- [175] X. Zhong. A new high-order immersed interface method for solving elliptic equations with imbedded interface of discontinuity. *J. Comput. Phys.*, 225 :1066–1099, 2007.
- [176] Y. Zhou, S. Zhao, M. Feig, and G. Wei. High order matched interface and boundary method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular source. *J. Comput. Phys.*, 213 :1–30, 2006.